Operatoren in der Quantenphysik

Tobias Wöhrer

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Die Welt im Kleinen ist eine Welt voller Rätsel. Die äußerst komfortable Vorstellung einer deterministisch bestimmbaren Welt ist - zumindest nach aktuell vorherrschender Meinung - nicht haltbar. Der Zufall spielt im subatomaren Bereich eine bedeutende Rolle und aus der Sicht der klassischen Physik muss man eingestehen, dass 'das alles nivellierende Gesetz der großen Zahlen die wahre Natur der einzelnen Prozesse völlig verschleiert'.[1] Wer die Welt der Quantenmechanik (und damit die fundamentalste, uns bekannte Lehre der Natur) verstehen will, erlangt durch die Kenntnisse ihres mathematischen Gerüsts einen bedeutenden Vorteil.

Mit der Entwicklung dieses Gerüsts stand die Wissenschaft vor keiner leichten Aufgabe. Es musste ein Weg gefunden werden, um die völlig neuartigen Phänomene zu beschreiben und zu interpretieren. Verschiedene Ansätze zur mathematischen Modellierung der Vorgänge wurden entwickelt. Diese kamen zwar den experimentellen Ergebnissen nahe, enthielten jedoch noch mathematische Lücken und waren nicht untereinander vereinbar. John von Neumann erkannte als Erster, dass die bereits vorhandenen Theorie der Hilberträume eine Modellierung erlaubte, die alle mathematischen Unstimmigkeiten beseitigte (siehe dazu [N]). Er lieferte damit ein solides mathematisches Fundament, das sowohl für die effiziente Weiterentwicklung der Quantenphysik als auch für das tiefere Verständnis der Vorgänge von großer Bedeutung war.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, die mathematische Grundlage der Quantenmechanik zu illustrieren. Wir werden erkennen, wie relevant die Errungenschaften der Operatortheorie auf Hilberträumen in dieser sehr aktuellen Anwendung sind. Dabei spielt die Spektraltheorie für selbstadjungierte unbeschränkte Operatoren eine zentrale Rolle. Wir sehen wie dieses mächtige Werkzeug eingesetzt wird, was dabei helfen kann, das Verständnis der Spektraltheorie zu festigen und die Motivation dieser nachzuvollziehen. Nach den nötigen Erweiterungen der Grundlagen aus der Funktionalanalysis (es werden hier die Kenntnisse aus den Vorlesungen FANA1 und FANA2 vorausgesetzt), werden die mathematischen Axiome der Quantentheorie physikalisch motiviert. Ausgehend von diesen, folgern wir einige unmittelbare mathematische Konsequenzen. Wir bestimmen einige wichtige Operatoren der Quantenmechanik, um so die grundsätzliche Vorgehensweise und ihre Schwierigkeiten vorzustellen. Zum Abschluss werden wir diese Operatoren in einfachen Versuchsanordnungen untersuchen.

Als Basis für diese Arbeit dienten in erster Linie die Bücher [B] und [T].

[1] Zitat: John v. Neumann, 28.12.1903 – 8.2.1957.

Teil I

Mathematische Grundlagen

1 Das Spektrum selbstadjungierter Operatoren

Wir bezeichnen die Menge der linearen Operatoren auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit dichtem Definitionsbereich als $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

Definition 1.1. Ein Operator $A \in \mathcal{L}(H)$ wird als **symmetrisch** (oder **hermitesch**) bezeichnet, wenn

$$\langle A\psi, \psi\rangle = \langle \psi, A\psi\rangle \qquad \text{für } \psi, \phi \in \mathcal{D}(A)$$

erfüllt ist.

Der **adjungierte Operator** A^* eines dicht definierten Operators sei wie folgt definiert:

$$\mathcal{D}(A^*) := \{\phi \in \mathcal{H} \mid \exists \psi^* \in \mathcal{H} : \langle A\psi, \phi\rangle = \langle \phi, \psi^*\rangle \text{ für } \psi \in \mathcal{D}(A)\}$$
$$A^*\psi := \psi^*$$

Für symmetrische Operatoren gilt also $A \subseteq A^*$. Gilt sogar $A = A^*$, nennt man A **selbstadjungiert**.

Definition 1.2. Ein Operator A wird als **abgeschlossen** bezeichnet, wenn für jede Folge $(\psi_n) \in \mathcal{D}(A)$, für die die Limiten $\psi := \lim_{n\to\infty} \psi_n$, und $\phi := \lim_{n\to\infty} A\psi_n$ existiert, gilt: $A\psi = \phi$

Definition 1.3. Sei A ein dicht definierter abgeschlossener Operator, dann werden die Mengen

$$\rho(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid (A - \lambda) : \mathcal{D}(A) \to \mathcal{H} \text{ ist bijektiv}\}$$
$$\sigma(A) := \mathbb{C} \setminus \rho(A)$$

als **Resolventenmenge** von A und **Spektrum** von A bezeichnet. Für $\lambda \in \rho(A)$ wird $R_A(\lambda) := (A - \lambda)^{-1}$ als **Resolvente** von A bezeichnet.

Seien $A, \tilde{A}$ Operatoren. Dann bezeichnen wir den Operator $\tilde{A}$ als Erweiterung von A, wenn sowohl $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(\tilde{A})$, als auch $\tilde{A}\psi = A\psi$ für alle $\psi \in \mathcal{D}(A)$ erfüllt ist. Ist $\tilde{A}$ eine Erweiterung von A, so schreiben wir auch $A \subseteq \tilde{A}$.

Bemerkung 1.4.

1. Da $R_A(\lambda)$ für $\lambda \in \rho(A)$ überall definiert ist, folgt aus dem Satz des abgeschlossenen Graphen, dass die Abbildung beschränkt ist. Für $\lambda, \lambda' \in \rho(A)$ gilt die **erste Resolventengleichung** (siehe [BL], S32)

   $$R_A(\lambda) - R_A(\lambda') = (\lambda - \lambda')R_A(\lambda)R_A(\lambda'),$$

   sowie die Abschätzung

   $$\|R_A(\lambda)\| \geq \frac{1}{\mathrm{dist}(\lambda, \sigma(A))}.$$

2. Seien A und B abgeschlossene Operatoren mit $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(B)$. Dann ist auch $A+B$ abgeschlossen mit $\mathcal{D}(A+B) = \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$. Für ein $z \in \rho(A) \cap \rho(A+B)$ gilt

$$\begin{aligned} R_{A+B}(z) + R_A(z)BR_{A+B}(z) &= (1 + R_A(z)B)R_{A+B}(z) \\ &= R_A(z)(A+B-z)R_{A+B}(z) = R_A(z) \end{aligned}$$

   und genauso $R_{A+B}(z) + R_{A+B}(z)BR_A(z) = R_A(z)$.

   Dieser weitere Zusammenhang der Resolventen heißt **zweite Resolventengleichung**:

$$R_{A+B}(z) - R_A(z) = -R_A(z)BR_{A+B}(z) = -R_{A+B}BR_A(z) \quad z \in \rho(A) \cap \rho(A+B)$$

3. Ist A ein selbstadjungierter Operator, so ist $\sigma(A)$ eine nichtleere abgeschlossene Teilmenge von $\mathbb{R}$ mit $\sigma_r(A) = \emptyset$ (siehe [BL], Satz 3.2.7).

4. A^* ist nach [BL], Satz 3.2.2 ein abgeschlossener Operator, daher ist jeder selbstadjungierte Operator abgeschlossen.

5. Ist $\mathcal{D}(A^*)$ dicht in $\mathcal{H}$, so besitzt nach [BL], Satz 3.2.3 A eine kleinste abgeschlossene Erweiterung $\overline{A} := A^{**}$.
   Für A symmetrisch gilt $A \subseteq A^*$ und damit $\overline{A} = A^{**} \subseteq A^*$. Nach Definition der Adjungierten von A^* gilt:

$$\langle A^*\phi, \psi \rangle = \langle \phi, \overline{A}\psi \rangle, \quad \psi \in \mathcal{D}(\overline{A}), \phi \in \mathcal{D}(A^*)$$

   Wegen $\mathcal{D}(\overline{A}) \subseteq \mathcal{D}(A^*)$ gilt $A^*\phi = \overline{A}\phi, \phi \in \mathcal{D}(\overline{A})$ und daher ist $\overline{A}$ wieder symmetrisch.

6. Die Adjungierten von $\overline{A}$ und A stimmen wegen

$$\overline{A}^* = A^{***} = (A^*)^{**} = \overline{(A^*)} = A^*$$

   stets überein.

7. Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ symmetrisch. Dann existiert eine selbstadjungierte Erweiterung von A genau dann, wenn $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ erfüllt ist.
   Denn wenn $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ erfüllt ist, verschwinden die Defektindizes von $\overline{A}$. Nach [BL], Satz 3.4.4 ist damit $\overline{A}$ selbstadjungiert. Die andere Richtung folgt nach [BL], Satz 3.2.7

Folgendes Lemma liefert ein hinreichendes Kriterium für Elemente des Spektrums, das ohne Resolvente auskommt. Speziell für selbstadjungierte Operatoren erhalten wir eine äquivalente Formulierung für das Spektrum.

Lemma 1.5. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ und $\lambda \in \mathbb{C}$. Existiert eine Folge $(\psi_n) \in \mathcal{D}(A)$, mit $\|\psi_n\| = 1, n \in \mathbb{N}$ und $\lim_{n\to\infty} \|(A-\lambda)\psi_n\| = 0$ (**Weylfolge**), so gilt $\lambda \in \sigma(A)$. Ist λ ein Punkt des Randes von $\rho(A)$, gilt auch die Umkehrung.*

Beweis.
Sei $(\psi)_n$ eine Weylfolge. Angenommen $\lambda \in \rho(A)$, dann gilt

$$1 = \|\psi_n\| = \|R_A(\lambda)(A-\lambda)\psi_n\| \leq \|R_A(\lambda)\|\|(A-\lambda)\psi_n\|.$$

Ein Widerspruch, da die rechte Seite nach Voraussetzung beliebig klein wird.

Sei $\lambda \in \partial\rho(A) := \overline{\rho(A)} \setminus \rho(A) \subseteq \sigma(A)$.

Fall 1; $\lambda \in \sigma_p(A) \cap \partial\rho(A)$: Es existiert ein $\psi \in \mathcal{H}, \|\psi\| = 1$ mit $(A-\lambda)\psi = 0$. Die Folge $(\psi_n) := \psi$ ist also eine Weylfolge.

Fall 2; $\lambda \in \sigma_p^c(A) \cap \partial\rho(A)$: Es existiert eine Folge $(\lambda_n) \in \rho(A)$ die gegen λ konvergiert. $R_A(\lambda) := (A-\lambda)^{-1}$ existiert auf $\operatorname{Ran}(A-\lambda)$ und wegen

$$\lim_{n\to\infty} \|R_A(\lambda_n)\| \geq \lim_{n\to\infty} \frac{1}{\operatorname{dist}(\lambda_n, \sigma(A))} \to \infty$$

existiert eine Folge $(\phi_n) \in \operatorname{Ran}(A-\lambda)$, sodass

$$\frac{\|R_A(\lambda_n)\phi_n\|}{\|\phi_n\|} \to \infty.$$

Sei $\psi_n := R_A(\lambda_n)\phi_n$. Dabei sei ϕ_n so gewählt, dass $\|\psi_n\| = 1$ erfüllt ist, wodurch $\|\phi_n\| \to 0$ folgt. Wegen der Resolventengleichung gilt:

$$\begin{aligned}
\|(A-\lambda)\psi_n\| &= \|(A-\lambda)R_A(\lambda_n)\phi_n\| = \|(A-\lambda)[R_A(\lambda)(1+(\lambda_n-\lambda)R_A(\lambda_n))]\phi_n\| \\
&= \|\phi_n + (\lambda_n-\lambda)\psi_n\| \leq \|\phi_n\| + |\lambda_n-\lambda|\|\phi_n\| \to 0
\end{aligned}$$

$\square$

2 Der Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren

Definition 2.1. Sei M eine Menge, Ω eine σ-Algebra auf M und $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum. Ein **Spektralmaß** für $\langle M, \Omega, \mathcal{H}\rangle$ ist eine Funktion $E : \Omega \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$, sodass gilt:

- Für jedes $\Delta \in \Omega$ ist $E(\Delta)$ eine orthogonale Projektion.
- $E(\emptyset) = 0$ und $E(M) = I$.
- $E(\Delta_1)E(\Delta_2) = E(\Delta_1 \cap \Delta_2)$ für $\Delta_1, \Delta_2 \in \Omega$.
- Für $\Delta_n \in \Omega$, $n \in \mathbb{N}$ paarweise disjunkt, gilt

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} E(\Delta_n)\psi = E(\bigcup_{n\in\mathbb{N}} \Delta_n)\psi, \quad \psi \in \mathcal{H}.$$

Die σ-Additivität gilt also in der starken Operatortopologie, in der Regel jedoch nicht in der Operatornorm.
Für $\psi, \phi \in \mathcal{H}$ ist durch die Abbildung $\mu_{\psi,\phi}(\Delta) := \langle E(\Delta)\psi, \phi\rangle$ ein komplexes Maß auf Ω definiert. Im Speziellen ist dann $\mu_\psi := \mu_{\psi,\psi}$ ein positives endliches Maß.

Satz 2.2. *Seien $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ borelmessbare Funktionen. Dann existiert für jedes Spektralmaß E auf $\langle \mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \mathcal{H}\rangle$ eine Abbildung*

$$\Phi_E : \mathcal{M}(\mathcal{B}(\mathbb{R}), \mathbb{R}) \to \mathcal{L}(\mathcal{H}),\ f \mapsto \Phi_E(f),$$

für die gilt:

1. $\mathcal{D}(\Phi_E(f)) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\psi < +\infty\}$
2. $\langle \Phi_E(f)\psi, \phi\rangle = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\mu_{\psi,\phi}, \quad \psi \in \mathcal{D}(\Phi_E(f)), \phi \in \mathcal{H}$
3. $\|\Phi_E(f)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\psi$
4. $\Phi_E(\chi_\Delta) = E(\Delta), \quad \Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$
5. $\Phi_E(f)^* = \Phi_E(\overline{f})$
6. $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$:
   $\alpha\Phi_E(f) + \beta\Phi_E(g) \subseteq \Phi_E(\alpha f + \beta g), \quad \mathcal{D}(\alpha\Phi_E(f) + \beta\Phi_E(g)) = \mathcal{D}(\Phi_E(|f| + |g|))$
7. $\Phi_E(f)\Phi_E(g) \subseteq \Phi_E(fg), \quad \mathcal{D}(\Phi_E(f)\Phi_E(g)) = \mathcal{D}(\Phi_E(g)) \cap \mathcal{D}(\Phi_E(fg))$

Satz 2.3. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ selbstadjungiert. Dann existiert ein eindeutiges Spektralmaß E_A auf $\langle \mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \mathcal{H}\rangle$, sodass*

$$\begin{aligned}
&\langle A\psi, \phi\rangle = \langle \Phi_{E_A}(\mathrm{id})\psi, \phi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_{\psi,\phi}, \quad \psi \in \mathcal{D}(A), \phi \in \mathcal{H}\\
&\|A\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\mu_\psi, \quad \psi \in \mathcal{D}(A)\\
&\mathcal{D}(A) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\mu_\psi < +\infty\}.
\end{aligned}$$

Wir können also das Funktionalkalkül auf das Spektralmaß E_A anwenden und verwenden auch die Schreibweise $f(A) := \Phi_{E_A}(f)$ für borelmessbare f.

Proposition 2.4. *Sei E ein Spektralmaß und $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ borelmessbare Funktionen. E_g sei definiert durch $E_g(\Delta) := E(g^{-1}(\Delta))$ für alle $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$. Dann ist E_g ein Spektralmaß und es gilt*

$$\langle \Phi_{E_g}(f)\psi, \phi\rangle = \langle \Phi_E(f \circ g)\psi, \phi\rangle \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(\Phi_{E_g}(f)), \phi \in \mathcal{H}.$$

Beweis.
Da g auf ganz $\mathbb{R}$ definiert ist und das Urbild einer Funktion mit Durchschnitt und Vereinigung von Mengen verträglich ist, übertragen sich die Spektralmaßeigenschaften von E unmittelbar auf E_g. Mit Hilfe des Transformationssatzes aus der Maßtheorie folgt:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi_{E_g}(f)\psi, \phi\rangle &= \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\mu_{\psi,\phi}(g^{-1}(\lambda))\\
&= \int_{g^{-1}(\mathbb{R})} f \circ g(\lambda) d\mu_{\psi,\phi}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} f \circ g(\lambda) d\mu_{\psi,\phi}(\lambda) = \langle \Phi_E(f \circ g)\psi, \phi\rangle
\end{aligned}$$

$\square$

Im Speziellen ist also für einen selbstadjungierten Operator A mit Spektralmaß E_A, das Spektralmaß von $g(A)$ gegeben durch $E_A(g^{-1}(\cdot))$.

Lemma 2.5. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ selbstadjungiert und E_A das Spektralmaß von A. Dann gilt*

$$\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid E_A((\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)) \neq 0,\, \epsilon > 0\}.$$

Beweis.
Für λ_0 definieren wir die absteigende Intervallfolge $I_n := (\lambda_0 - \frac{1}{n}, \lambda_0 + \frac{1}{n})$.

1 Fall; $E_A(I_n) \neq 0$ für $n \in \mathbb{N}$:
Für $n \in \mathbb{N}$ existiert ein $\psi_n \in E_A(I_n)\mathcal{H}$ mit $\|\psi_n\| = 1$. Daraus folgt

$$\begin{aligned} \|(A - \lambda_0)\psi_n\|^2 &= \|(A - \lambda_0)E_A(I_n)\psi_n\|^2 = \|\Phi(\mathrm{id}) - \Phi(\lambda_0)\Phi(\chi_{I_n})\psi_n\|^2 \\ &= \|\Phi((\mathrm{id} - \lambda_0)\chi_{I_n})\psi_n\|^2 = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - \lambda_0)^2 \chi_{I_n}(\lambda) d\mu_{\psi_n}(\lambda) \\ &\leq \mu_{\psi_n}(I_n)\frac{1}{n^2} \leq \frac{1}{n^2}. \end{aligned}$$

Daher ist (ψ_n) eine Weylfolge, woraus $\lambda_0 \in \sigma(A)$ nach Lemma 1.5 folgt.

2 Fall; Es existiert ein $\epsilon > 0$, sodass $E_A((\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)) = 0$ erfüllt ist:
Sei

$$f_\epsilon(\lambda) := \chi_{\mathbb{R}\setminus(\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)}(\lambda)(\lambda - \lambda_0)^{-1}.$$

Es gilt

$$(A - \lambda_0)\Phi(f_\epsilon) = \Phi((\mathrm{id}(\lambda) - \lambda_0)f_\epsilon(\lambda)) = \Phi(\chi_{\mathbb{R}\setminus(\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)}(\lambda)) = E_A(\mathbb{R} \setminus (\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)) = I.$$

Genauso zeigt man $\Phi(f_\epsilon)(A - \lambda_0) = I|_{\mathcal{D}(A)}$. Es folgt $\lambda_0 \in \rho(A)$.

$\square$

Im Speziellen gilt also $E_A((\lambda_1, \lambda_2)) = 0$ genau dann, wenn $(\lambda_1, \lambda_2) \subseteq \rho(A)$ erfüllt ist.

Satz 2.6. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ein selbstadjungierter Operator und E_A das Spektralmaß von A. Dann gilt*

$$E_A(\sigma(A)) = I \quad \textit{und} \quad E_A(\mathbb{R} \cap \rho(A)) = 0.$$

Beweis.
Für $\lambda \in \rho(A) \cap \mathbb{R}$ gibt es nach Lemma 2.5 ein offenes Intervall I_λ mit $E_A(I_\lambda) = 0$. Dann ist $\{I_\lambda \mid \lambda \in \rho(A) \cap \mathbb{R}\}$ eine offene Überdeckung von $\rho(A) \cap \mathbb{R}$. Da wir uns auf $\mathbb{R}$ befinden, existiert eine abzählbare Teilüberdeckung $(J_n)_{n\in\mathbb{N}}$, die bereits ganz $\rho(A) \cap \mathbb{R}$ überdeckt. $\Delta_n := J_n \setminus \bigcup_{m \leq n} J_m$ ist dann eine disjunkte Überdeckung von Borelmengen mit $E_A(\Delta_n) = 0$. Aus der starken σ-Additivität von E_A folgt

$$0 = \|\sum_{n\in\mathbb{N}} E_A(\Delta_n)\psi\| \geq \|E_A(\rho(A) \cap \mathbb{R})\psi\| \geq 0.$$

$\square$

Es gilt also

$$\langle A\psi, \phi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_{\psi,\phi} = \int_{\sigma(A)} \lambda d\mu_{\psi,\phi}, \quad \psi \in \mathcal{D}(A), \phi \in \mathcal{H}.$$

Korollar 2.7. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ selbstadjungiert. Dann gilt*

$$\inf \sigma(A) \quad = \quad \inf\{\langle A\psi, \psi\rangle \mid \psi \in \mathcal{D}(A), \|\psi\| = 1\}$$

und

$$\sup \sigma(A) \quad = \quad \sup\{\langle A\psi, \psi\rangle \mid \psi \in \mathcal{D}(A), \|\psi\| = 1\}.$$

Beweis.
1 Fall; $\inf \sigma(A) = \lambda_0 \in \mathbb{R}$:
Die Ungleichung $\inf\langle A\psi, \psi\rangle \geq \inf \sigma(A)$ folgt aus

$$\langle A\psi, \psi\rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda d\mu_\psi \geq \lambda_0 \mu_\psi(\sigma(A)) = \lambda_0.$$

Wegen der Abgeschlossenheit von $\sigma(A)$ gilt $\lambda_0 \in \sigma(A)$. Aus Lemma 2.5 folgt für $\epsilon > 0$ die Existenz eines $\psi \in E_A(\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)\mathcal{H}$ mit Norm 1. Mit der Projektoreigenschaft folgt

$$\inf\langle A\psi, \psi\rangle \leq \langle A\psi, \psi\rangle = \langle AE_A(\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)\psi, \psi\rangle = \int_{\sigma(A)} \chi_{(\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)} d\mu_\psi =$$

$$\int_{(\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)} \lambda d\mu_\psi \leq (\lambda_0 + \epsilon) \underbrace{\mu_\psi(\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)}_{1}.$$

Da ϵ beliebig war, folgt $\inf\langle A\psi, \psi\rangle \leq \inf \sigma(A)$.

2 Fall; $\inf \sigma(A) = -\infty$:
In diesem Fall existiert eine Folge $(\lambda_n) \in \sigma(A)$ mit $\lim_{n\to\infty} \lambda_n = -\infty$. Es folgt die Existenz einer Folge (ψ_n) mit $\psi_n \in E(\lambda_n - \frac{1}{n}, \lambda_n + \frac{1}{n})\mathcal{H}$ für $n \in \mathbb{N}$. Durch die gleiche Ungleichung wie im 1. Fall erhalten wir $\inf\langle A\psi, \psi\rangle = -\infty$.

Für die entsprechende Gleichheit der Suprema geht man analog vor.

□

Satz 2.8. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ selbstadjungiert und $f \in C(\sigma(A))$. Dann gilt $\sigma(f(A)) = \overline{f(\sigma(A))}$.*

Beweis.
$\overline{f(\sigma(A))} \subseteq \sigma(f(A))$:
Sei $y = f(x)$ mit $x \in \sigma(A)$. Weil f stetig ist, existiert für alle Umgebungen U von y ein $\delta > 0$, sodass $f((x-\delta, x+\delta)) \subseteq U(y)$ und damit $(x-\delta, x+\delta) \subseteq f^{-1}(U(y))$ erfüllt ist. Weil x im Spektrum von A liegt, folgt aus Lemma 2.5, dass $E_A(x - \delta, x + \delta) \neq 0$. Daher auch $E_A(f^{-1}(U(y))) \neq 0$. Nach Proposition 2.4 gilt damit $E_{f(A)}(U(y)) \neq 0$, was bedeutet, dass $y \in \sigma(f(A))$. Da das Spektrum von $f(A)$ abgeschlossen ist, also $\overline{f(\sigma(A))} = \sigma(f(A))$.

$\sigma(f(A)) \subseteq \overline{f(\sigma(A))}$:
Sei $z \notin \overline{f(\sigma(A))}$. Es existiert eine Umgebung U von z, sodass $U(z) \cap \overline{f(\sigma(A))} = \emptyset$. Daher gilt auch $f^{-1}(U(z)) \cap \sigma(A) = \emptyset$. Mit Satz 2.6 folgt $E_A(f^{-1}(U(z))) = 0$ und damit $E_{f(A)}(U(z)) = 0$. Wieder nach Lemma 2.5 kann also z nicht im Spektrum von $f(A)$ liegen.

□

3 Das essentielle Spektrum

Definition 3.1. Das **diskrete Spektrum** $\sigma_d(A)$ eines Operators A ist die Menge aller isolierten Eigenwerte mit endlich dimensionalem Eigenraum. Das **wesentliche Spektrum** sei definiert als $\sigma_{ess}(A) := \sigma(A) \setminus \sigma_d(A)$.

Für selbstadjungierte Operatoren lassen sich diese Mengen nach Lemma 2.5 auch charakterisieren als

$$\sigma_d(A) := \{\lambda \in \sigma_p(A) \mid \exists \epsilon > 0 : \dim(\operatorname{Ran} E_A(\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)) < \infty\} \text{ und}$$

$$\sigma_{ess}(A) := \{\lambda \in \sigma(A) \mid \dim(\operatorname{Ran} E_A(\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)) = \infty \,, \forall \epsilon > 0\}.$$

Wir erinnern an folgende

Definition 3.2. Ein Operator $K \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißt **kompakt**, wenn gilt: Für jede beschränkte Folge (ψ_n) in $\mathcal{H}$ enthält $(K\psi_n)$ eine in der Norm konvergente Teilfolge.

Sei $K \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ kompakt und damit beschränkt[2]. Nachdem das Spektrum kompakter Operatoren höchstens einen Häufungspunkt bei 0 hat (siehe [W], Satz 6.4.8), gilt

$$\sigma_{ess}(K) \subseteq \{0\},$$

wobei 0 genau dann im Spektrum liegt, wenn $\mathcal{H}$ unendlich dimensional ist.

Wir wollen uns nun die Frage stellen, unter welchen Störungen von A, der Form $\tilde{A} = A + S$, $S \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, das Spektrum gleich bleibt.
Addiert man zu einem selbstadjungierten Operator A ein Vielfaches der Identität, verschiebt sich das gesamte Spektrum. Eine beschränkte Störung lässt das Spektrum von A im Allgemeinen also nicht unverändert. Für einen Eigenwert λ des diskreten Spektrums wird dieser bereits durch eine beliebig kleine Störung der Form

$$A + \epsilon E_A(\{\lambda\})$$

aufgehoben. Es zeigt sich jedoch, dass das wesentliche Spektrum unter gewissen Operatoren invariant bleibt.

Lemma 3.3. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ selbstadjungiert. Dann gilt $\lambda \in \sigma_{ess}(A)$ genau dann, wenn es eine Folge $(\psi_n) \in \mathcal{H}$ gibt mit*

- $\|\psi_n\| = 1$ *für* $n \in \mathbb{N}$
- $(\psi_n, \phi) \to 0, \forall \phi \in \mathcal{H}$ *(schwache Konvergenz gegen 0) und*
- $\|(A - \lambda)\psi_n\| \to 0.$

*Eine solche Folge wird als **singuläre Weylfolge** bezeichent und kann hier insbesondere orthonormal gewählt werden.*

Beweis.

[2]Die Definition 3.2 ist äquivalent dazu, dass der Abschluss des Bildes der Einheitskugel kompakt ist. Da in einem normierten Raum jede kompakte Menge beschränkt ist, folgt die Beschränktheit für kompakte Operatoren.

Sei (ψ_n) eine singuläre Weylfolge für $\lambda_0 \in \mathbb{R}$. Aus Lemma 1.5 folgt, $\lambda_0 \in \sigma(A)$.
Angenommen $\lambda_0 \in \sigma_d(A)$, dann existiert ein $\epsilon > 0$, sodass für $E_\epsilon := E_A(\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)$ die Dimension von $\mathrm{Ran}(E_\epsilon)$ endlich ist. Für die Folge $\tilde{\psi}_n := E_\epsilon \psi_n$ gilt

$$\|(A-\lambda_0)\tilde{\psi}_n\| = \|E_\epsilon(A-\lambda_0)\psi_n\| \le \|(A-\lambda_0)\psi_n\| \to 0.$$

Da ψ_n schwach gegen 0 konvergiert und E_ϵ kompakt ist, gilt $\|\tilde{\psi}_n\| \to 0$. Es gilt jedoch

$$\begin{aligned}\|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|^2 &= \int_{\mathbb{R}} d\mu_{\psi_n}(\lambda) - \int_{(\lambda_0-\epsilon,\lambda_0+\epsilon)} d\mu_{\psi_n}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}\setminus(\lambda_0-\epsilon,\lambda_0+\epsilon)} d\mu_{\psi_n}(\lambda) \\ &\le \frac{1}{\epsilon^2}\int_{\mathbb{R}\setminus(\lambda_0-\epsilon,\lambda_0+\epsilon)} (\lambda-\lambda_0)^2 d\mu_{\psi_n}(\lambda) \le \frac{1}{\epsilon^2}\|(A-\lambda_0)\psi_n\|^2.\end{aligned}$$

Womit der Widerspruch $\|\tilde{\psi}_n\| \to 1$ folgt.

Sei $\lambda_0 \in \sigma_{ess}(A)$. Man betrachte die Operatorenfolge

$$E_n := E_A([\lambda_0 - \frac{1}{n}, \lambda_0 + \frac{1}{n+1})) \cup E_A((\lambda_0 + \frac{1}{n+1}, \lambda_0 + \frac{1}{n}]).$$

Es existiert eine unendliche Teilfolge (E_{n_j}) mit $\dim(\mathrm{Ran}\, E_{n_j}) > 0$. Da die Intervalle alle disjunkt sind, gibt es orthonormale $\psi_j \in \mathrm{Ran}\, E_{n_j}$. Mit $I_n := [\lambda_0 - \frac{1}{n}, \lambda_0 + \frac{1}{n+1}) \cup (\lambda_0 + \frac{1}{n+1}, \lambda_0 + \frac{1}{n}]$ folgt

$$\|(A-\lambda_0)\psi_j\|^2 = \|(A-\lambda_0)E_{n_j}\psi_j\|^2 = \int_{I_n} (\lambda-\lambda_0)^2 d\mu_{\psi_j} \le \frac{1}{n_j^2}\underbrace{\mu_{\psi_j(I_n)}}_{1}.$$

Wegen der Orthogonalität der ψ_j gilt $(\psi_j, \phi) \to 0$ für alle $\phi \in \mathcal{H}$.

$\square$

Lemma 3.4. *Ein beschränkter Operator K ist genau dann kompakt, wenn aus $(\psi_n) \xrightarrow{\omega} \psi$ folgt, dass $(K\psi_n) \xrightarrow{\|\cdot\|} K\psi$.*

Beweis.
Sei K kompakt. Angenommen aus $\psi_n \xrightarrow{\omega} \psi$ folgt nicht $K\psi_n \xrightarrow{\|\cdot\|} K\psi$ für ein $\psi \in \mathcal{H}$. Dann existiert ein $\epsilon > 0$ und eine Teilfolge mit $\phi_j := K\psi_{n_j}$, sodass $\|K\psi - \phi_j\| \ge \epsilon$, $\forall j \in \mathbb{N}$. Nachdem jede schwach konvergente Folge beschränkt ist, existiert nach Definition eine Teilfolge (ψ_{n_k}), für die (ϕ_{j_k}) schwach gegen ein ϕ konvergiert. Da K stetig ist, gilt $K\psi_n \xrightarrow{\omega} K\psi$ und wegen der Eindeutigkeit des Grenzwertes gilt somit $\phi = K\psi$ im Widerspruch zur Annahme.
Sei umgekehrt (ψ_n) eine beschränkte Folge. $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ sei eine orthonormale Basis von $\mathcal{H}$. Dann ist für $k = 1$ die Folge $\langle \psi_n, \phi_1 \rangle$ beschränkt in $\mathbb{C}$. Daher existiert eine beschränkte Teilfolge $(\psi_{n_{j_1}})$, für die $\langle \psi_{n_{j_1}}, \phi_1 \rangle$ konvergiert. Für $k = 2$ kann nun aus (ψ_{j_1}) wieder eine Teilfolge (ψ_{j_2}) gewählt werden, für die $\langle \psi_{n_{j_2}}, \phi_2 \rangle$ konvergiert. Setzen wir dieses Verfahren rekursiv fort, erhalten wir für jedes $k \in \mathbb{N}$ eine konvergente Folge. Wegen der Cantorschen Diagonalisierung gibt es dann eine Folge (ψ_{n_j}) die für alle $k \in \mathbb{N}$ konvergiert. Da ψ_n beschränkt ist, gilt für $\phi = \sum_k a_k \phi_k \in \mathcal{H}$

$$|\langle \psi_{n_j}, \phi \rangle|^2 = |\langle \psi_{n_j}, \sum_k a_k \phi_k \rangle|^2 \le \|\psi_{n_j}\|^2 \|\sum_k a_k \phi_k\|^2 \le C \sum_k |a_k|^2 < +\infty.$$

Wir können also die Grenzwerte für j und k vertauschen, womit $\langle \psi_{n_j}, \phi \rangle$ für alle $\phi \in \mathcal{H}$ konvergiert. Nach Voraussetzung konvergiert nun $(K\psi_{n_j})$ in der Norm, also ist K nach Definition kompakt.

$\square$

Lemma 3.5. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ selbstadjungiert. Das wesentliche Spektrum von A ist genau die unter kompakten Störungen invariante Menge des Spektrums.*

$$\sigma_{ess}(A) = \bigcap_{K=K^*, K\, kompakt} \sigma(A+K)$$

Beweis.
Sei K ein selbstadjungierter kompakter Operator und (ψ_n) eine singuläre Weylfolge für λ. Es folgt

$$\|(A+K-\lambda)\psi_n\| \leq \|(A-\lambda)\psi_n\| + \|K\psi_n\| \to 0.$$

Also $\sigma_{ess}(A) \subseteq \sigma_{ess}(A+K)$. Ist (ψ_n) eine singuläre Weylfolge für $A+K$, so gilt

$$\|(A-\lambda)\psi_n\| = \|(A-\lambda+K-K)\psi_n\| \leq \|(A+K-\lambda)\psi_n\| + \|K\psi_n\| \to 0.$$

Wir erhalten $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(A+K)$. Insbesondere sind die Weylfolgen für A und $A+K$ dieselben. Wie oben erwähnt, lässt sich jeder Punkt aus dem diskreten Spektrum durch eine (kompakte) Störung $\epsilon E(\{\lambda\})$ herausnehmen.

$\square$

Die Invarianz des wesentlichen Spektrums lässt sich sogar auf eine größere Gruppe von Operatoren ausweiten.

Satz 3.6. *Es seien $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ selbstadjungierte Operatoren. Ist für ein $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$ $R_A(z) - R_B(z)$ ein kompakter Operator, so gilt*

$$\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$$

Beweis.
Sei $\lambda \in \sigma_{ess}(A)$ und (ψ_n) die entsprechende singuläre Weylfolge. Wegen

$$\begin{aligned} \left(R_A(z) - \frac{1}{\lambda - z}\right)\psi_n &= \left(\frac{R_A(z)(\lambda - z) - 1}{\lambda - z}\right)\psi_n = \frac{R_A(z)}{z-\lambda}((A-z)-(\lambda-z))\psi_n \\ &= \frac{R_A(z)}{z-\lambda}(A-\lambda)\psi_n \end{aligned}$$

gilt

$$\|(R_A(z) - \frac{1}{\lambda - z})\psi_n\| \leq \|R_A(z)\||z-\lambda|^{-1}\|(A-\lambda)\psi_n\| \to 0. \tag{1}$$

Da laut Voraussetzung $R_A(z) - R_B(z)$ kompakt ist, folgt

$$\left\|\left[(R_A(z) - \frac{1}{\lambda - z}) - (R_B(z) - \frac{1}{\lambda - z})\right]\psi_n\right\| = \|(R_A(z) - R_B(z))\psi_n\| \to 0 \tag{2}$$

und damit auch

$$\|(R_B(z) - \frac{1}{\lambda - z})\psi_n\| = \frac{1}{|z-\lambda|}\|(B-\lambda)\underbrace{R_B(z)\psi_n}_{=:\phi_n}\| \to 0.$$

Wegen (1) und (2) gilt

$$\lim_{n\to\infty} \|\phi_n\| = \lim_{n\to\infty} \|R_A(z)\psi_n\| = \frac{1}{|\lambda - z|} \neq 0,$$

also lässt sich ϕ_n normieren und weiters

$$\lim_{n\to\infty} \langle \phi_n, \phi \rangle = \lim_{n\to\infty} \langle R_A(z)\psi_n, \phi \rangle = \lim_{n\to\infty} \langle \psi_n, R_A(z)^* \phi \rangle \to 0.$$

Es existiert also eine singuläre Weylfolge bezüglich B für λ, daher $\lambda \in \sigma_{ess}(B)$. Vertauscht man die Rollen von A und B, folgt die behauptete Gleichheit.

□

Bemerkung 3.7.
Ein Operator $K \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, für den $KR_A(z)$ für ein z (und wegen der ersten Resolventengleichung für alle $z \in \rho(A)$) kompakt ist, heißt **relativ kompakt** bezüglich A. Wegen der zweiten Resolventengleichung $(-R_{A+K}(z)KR_A(z) = R_{A+K}(z) - R_A(z))$ ist daher auch $R_{A+K}(z) - R_A(z)$ kompakt. Satz 3.6 gilt also insbesondere für Operatoren A und $B = A + K$, wenn K relativ kompakt ist bezüglich A.

Wir wollen nun noch ein in der Physik oft auftretendes Beispiel für kompakte Operatoren betrachten.

Satz 3.8. *Sei die Funktion $k(x,y) \in L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$ gegeben. Dann ist der Operator K definiert als*

$$K\psi(x) := \int_{\mathbb{R}} k(x,y)\psi(y)dy, \quad \psi \in L^2(\mathbb{R})$$

*ein kompakter Operator auf $L^2(\mathbb{R})$. Operatoren mit einer Darstellung dieser Form werden als **Hilbert-Schmidt Operatoren** bezeichnet.*

Beweis.
Mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung gilt:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} |K\psi(x)|^2 dx &= \int_{\mathbb{R}} \left| \int_{\mathbb{R}} k(x,y)\psi(y)dy \right|^2 dx \leq \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} |k(x,y)^2| dy \right) \left(\int_{\mathbb{R}} |\psi(y)|^2 dy \right) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} |k(x,y)|^2 dy dx \int_{\mathbb{R}} |\psi(y)|^2 dy < \infty.\end{aligned}$$

Daher ist K ein beschränkter Operator.

Sei $\{\phi_i\}$ eine ONB von $L^2(\mathbb{R})$, dann ist $\{\phi_i(x)\overline{\phi_j(y)}\}$ eine ONB von $L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$. Da die Funktion $k(x,y)$ in $L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$ liegt, können wir diese in eine Fourierreihe entwickeln:

$$\begin{aligned} k(x,y) &= \sum_{i,j} \langle k(x,y), \phi_i(x)\overline{\phi_j(y)} \rangle_{L^2(\mathbb{R}\times\mathbb{R})} \phi_i(x)\overline{\phi_j(y)} \\ &= \sum_{i,j} \underbrace{\langle K\phi_j, \phi_i \rangle_{L^2(\mathbb{R})}}_{=:c_{ij}} \phi_i(x)\overline{\phi_j(y)} \\ &= \sum_{i,j} c_{ij}\phi_i(x)\overline{\phi_j(y)} \end{aligned}$$

Wegen der Parsevalschen Gleichung gilt

$$\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}}|k(x,y)|^2 dxdy = \sum_{i,j}|c_{ij}|^2 < \infty.$$

Für $n \in \mathbb{N}$ sei $k_n(x,y) := \sum_{i,j}^n c_{ij}\phi_i(x)\overline{\phi_j(y)}$. Es gilt $\|k_n\| \leq \|k\| < \infty$, daher folgt

$$K\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \lim_{n\to\infty} k_n(x,y)\psi(y)dy = \lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}} k_n(x,y)\psi(y)dy = \lim_{n\to\infty}\sum_{i,j}^{n} c_{ij}\phi_i(x)\langle\psi,\phi_j\rangle.$$

Als Grenzwert von Operatoren mit endlichdimensionalem Bild ist damit K ein kompakter Operator.

$\square$

Teil II

Quantentheorie

4 Beugung eines Elektronenstrahls an einem Spalt

Wir haben nun das mathematische Grundgerüst aufgebaut, dass wir in der Quantenmechanik benötigen. Jetzt wollen wir das Verhalten von Teilchen in der Quantenwelt anhand eines elementaren Experiments illustrieren, um dann die Axiome der Quantenmechanik aufzustellen.

Als Teilchenquelle dient ein Glühfaden, der Elektronen in identischem Zustand emittiert. Durch Variation der Glühfadentemperatur kann die Menge der emittierten Elektronen pro Zeiteinheit verändert werden. Der vom Glühfaden ausgehende Elektronenstrahl wird auf eine Barriere mit kleinem Spalt gelenkt. Hinter diesem Spalt befindet sich ein ortsempfindlicher Elektronendetektor, der den Aufprall der Elektronen in zusammengefassten Ortssektoren Δx zählt. Wir wollen nun den Graphen betrachten, der jedem Δx die Anzahl der dort aufgetroffenen Elektronen zuweist.

Als erster Versuch wird die Elektronenquelle für eine kurze Zeit mit hoher Intensität eingeschalten. Für eine hohe Anzahl an Elektronen erhalten wir näherungsweise das in Abbildung 1 dargestellte Bild. Das Ergebnis erinnert an die Lichtbeugung am optischen Spalt. Dieses Phäno-

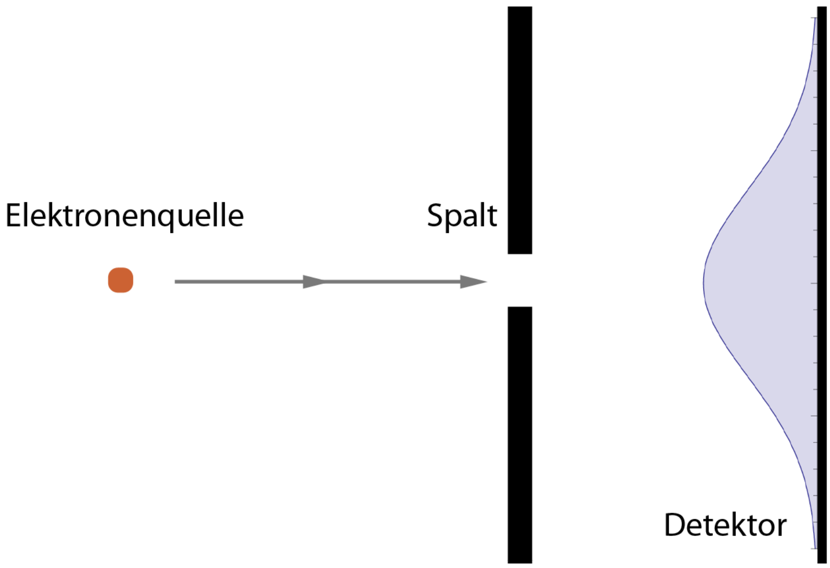

Abbildung 1: Versuch 1

men des Lichts lässt sich durch dessen Welleneigenschaft erklären. Genauso können wir nun den Elektronenstrahl als Elektronenwelle interpretieren. Diese Elektronenwelle, beschrieben durch eine periodische Funktion ψ, lässt sich über den klassischen Ansatz einer Wellengleichung bestimmen.[3] Die Lösung ψ dieser Gleichung wird als Wellenfunktion bezeichnet und bestimmt den Zustand der Elektronenwelle vollständig. Es stellt sich die Frage, ob dieses Wellenphänomen nur bei einer Vielzahl von gleichzeitig vorhandenen Elektronen (Elektronenstrahl) anzutreffen ist.

[3] Diesen Ansatz der Wellengleichung führte zur Entdeckung der Schrödingergleichung.

Im zweiten Versuch wird deshalb die Intensität der Elektronen verringert und die Einschaltdauer so verlängert, dass genauso viele Elektronen wie zuvor am Elektronendetektor aufprallen. Das Ergebnis stimmt mit dem des ersten Versuches überein. Wir können daraus schließen, dass die Welleneigenschaft dem einzelnen Elektron zuzuschreiben ist. Man spricht vom Welle-Teilchen Dualismus.

Für den dritten Versuch wird die Intensität, sowie die Einschaltdauer des Glühfadens drastisch verringert. Somit trifft nur eine sehr geringe Anzahl von Elektronen auf den Detektor. Bei mehrfacher Durchführung des Versuches erhält man Ergebnisse wie in Abbildung 2, die keinen Rückschluss auf ein Beugungsphänomen ermöglichen. Obwohl in der Versuchsanordnung nur Elektronen in gleichem Zustand emittiert werden, erhalten wir verschiedene Messwerte für einzelne Elektronen. Die Einzelmessungen sind also von zufälliger Natur. Dabei stellt man fest, dass die Wellenfunktion des Elektronenstrahls Aufschluss über die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Aufprallortes gibt.

In dieser Erkenntnis liegt der fundamentale Unterschied zur klassischen Physik. Denn in der klassischen Physik gibt es keine zufälligen Messwerte. Dort sind Messwerte eines Systems eindeutig durch dessen Zustand festgelegt und umgekehrt ist der Zustand des Systems über die Messwerte bestimmbar.

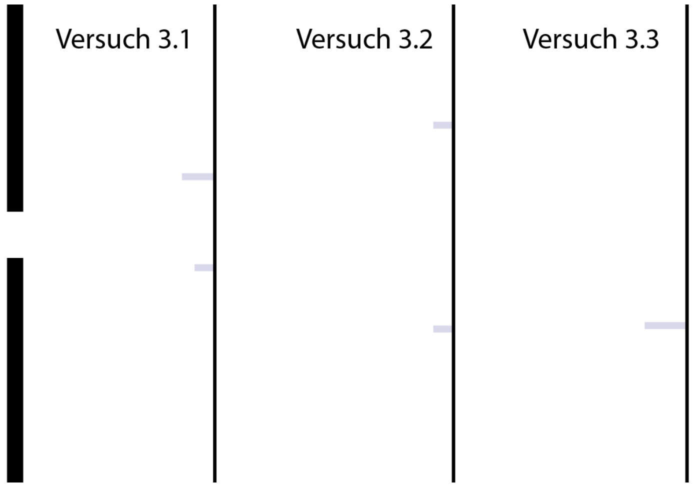

Abbildung 2: Versuch 3

In der Quantenphysik wird eine messbare Größe, wie Position, Impuls, Spin usw. als **Observable** bezeichnet. Anders als in der klassischen Physik, hat die Messung einer physikalischen Größe eines Zustandes in der Quantenphysik im Allgemeinen eine Auswirkung auf das System. Ein Teilchen im Zustand ψ vor der Messung, befindet sich nach der Messung in einem beeinflussten Zustand $\tilde{\psi}$. Wir wollen im weiteren Verlauf sowohl die Messwerte einer Observable, als auch den Einfluss der Messung auf das System mathematisch beschreiben.

Alle Observablen sind physikalische Größen und die gemessenen Werte sind somit ausschließlich reell. Wie bei der Position eines Teilchens, sind die Messwerte einer Observable bei gleichem Zustand zufällig und wir können nur eine statistische Aussage treffen.

5 Axiome der Quantentheorie

Für das mathematische Modell der Quantentheorie wurden folgende Axiome festgelegt, die wir im Anschluss motivieren wollen.

Axiom 1: *Der Zustandsraum eines Quantensystems wird durch einen separablen Hilbertraum $\mathcal{H}$ über $\mathbb{C}$ beschrieben. Die möglichen Zustände dieses Systems sind durch die Elemente von $\mathcal{H}$ mit Norm 1 gegeben.*

Axiom 2a: *Jede Observable a wird durch einen Operator $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ beschrieben, der keine echte Erweiterung besitzt.*
Axiom 2b: *Observablen erfüllen folgende Eigenschaft: Sei a eine Observable beschrieben durch den Operator A und ist p_n ein Polynom vom Grad n. Dann ist die Observable $p_n(a) := \sum_{i=1}^n a^i \alpha_i$ beschrieben durch den Operator $p(A) := \sum_{i=1}^n A^i \alpha_i$ mit Definitionsbereich $\mathcal{D}(p_n(A)) := \{\psi \in \mathcal{D}(A) \mid A\psi \in \mathcal{D}(A^{n-1})\}$ $(A^0 := I)$.*

Axiom 3: *Befindet sich ein System im Zustand $\psi \in \mathcal{D}(A)$, wird der Erwartungswert der Messwerte der Observable a beschrieben durch den reellen Wert*

$$\mathbb{E}_\psi(A) := \langle A\psi, \psi \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle.$$

Axiom 4: *Sei $\psi \in \mathcal{D}(A)$ der Zustand eines Quantensystems und ein Ja-Nein Experiment des Bereichs $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ der Observable a gegeben. Dann befindet sich das Quantensystem nach dem positiven bzw. negativen Resultat des Experiments im Zustand*

$$\frac{E_A(\Delta)\psi}{\|E_A(\Delta)\psi\|} \quad \textit{bzw.} \quad \frac{(I - E_A(\Delta))\psi}{\|(I - E_A(\Delta))\psi\|}.$$

Nach Axiom 2 und Axiom 3 folgt die Selbstadjungiertheit von A (siehe Kapitel 6). E_A ist daher das nach Satz 2.3 eindeutig bestimmte Spektralmaß von A.

Axiom 5: *Die zeitliche Entwicklung des Systems wird durch eine stark stetige Halbgruppe unitärer Operatoren beschrieben. Der infinitesimale Erzeuger dieser Gruppe beschreibt die Energie des Systems.*

Motivation zu Axiom 1:
Durch die wahrscheinlichkeitstheoretischen Resultate von Experimenten mit Quantensystemen ist eine gewisse algebraische Struktur der Zustände vorgegeben. Tatsächlich benötigen wir einen Vektorraum mit Skalarprodukt, wobei der Körper über dem Vektorraum nicht zwingend festgelegt ist. Wir wählen einen Hilbertraum über $\mathbb{C}$ zur Beschreibung eines Quantensystems. Die Wahl von $\mathbb{C}$ als Körper hat sich hier vorallem durch die bereits vorhandene Theorie etabliert. Für eine ausführliche Behandlung der notwendigen Struktur eines Quantensystems sei auf [B], Kapitel 13 verwiesen.

In dem einleitenden Experiment haben wir motiviert, dass wir den Zustand eines Teilchens durch eine komplexwertige Funktion

$$\psi(x, t) \quad \text{mit } (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R},$$

die als **Wellenfunktion** bezeichnet wird, beschreiben können. Zusätzlich wird für eine Wellenfunktion die Normierungsbedingung

$$\|\psi(\cdot,t)\| = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x,t)|^2 dx = 1, \quad t \in \mathbb{R}$$

gefordert, um die Funktion $\rho_t(x) := |\psi(x,t)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren zu können.

Da die möglichen Zustände eines Quantensystems in der Praxis meist endlich, oder höchstens abzählbar unendlich, angenommen werden, ist eine abzählbare Basis des Hilbertraums für die Beschreibung ausreichend.

Motivation zu Axiom 2 & Axiom 3:
Ist $|\psi(x,t)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Messwerte der Position eines Teilchens im Zustand ψ zum Zeitpunkt t und bezeichnet q die Observable der Position. So können wir den Erwartungswert der Messwerte der Position q durch

$$\mathbb{E}_{\psi(t)}(q) = \int_{\mathbb{R}^3} x|\psi(x,t)|^2 dx$$

berechnen. Dieser Erwartungswert lässt sich nun als Skalarprodukt $\langle Q\psi, \psi\rangle$ mit dem Operator $(Q\psi)(x) := x\psi(x)$ auffassen.

Wir wollen nun die Wahl eines Operator A auf dem Hilbertraum zur Beschreibung einer Observable a motivieren. Dabei setzen wir nun voraus, dass die Wellenfunktion $\psi \in \mathcal{H}$, durch die der Zustand des Quantensystem beschrieben wird, bereits bekannt ist. Die Messung einer physikalischen Größe ist in der Praxis nur bis zu einer bestimmten Genauigkeit möglich. Umgesetzt wird eine Messung durch das Zusammenfassen von Messbereichen. Dabei wird die Messung auf die Frage „Befindet sich der gemessene Wert im Bereich Δ?“ reduziert. Es gibt dabei nur zwei Ausgangsmöglichkeiten: Ja, es wurde ein Messwert in dem Bereich Δ registriert, oder Nein, der Wert befindet sich nicht im Bereich Δ. Man spricht daher von **„Ja-Nein Experimenten“**. Wiederholt man ein Ja-Nein Experiment für einen Zustand ψ in hoher Anzahl, erhalten wir eine Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Messwert bezüglich dieses Zustandes ψ innerhalb des Bereichs Δ liegt. Wir teilen den gesamten möglichen Messbereich (also im Allgemeinen $\mathbb{R}$) in Teilbereiche Δ, auf denen wir jeweils das Ja-Nein Experiment durchführen. Dadurch erhalten wir insgesamt für einen Zustand ψ ein Wahrscheinlichkeitsmaß μ_ψ^a für die Messbereiche einer Observable a. Für dieses Wahrscheinlichkeitsmaß existiert ein Spektralmaß E_A, sodass $\mu_\psi^a(\Delta) = \langle E_A(\Delta)\psi, \psi\rangle, \Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ erfüllt ist.[4] Über das Funktionalkalkül erhalten wir nun durch $A := \Phi_{E_A}(\mathrm{id})$ einen eindeutigen Operator. Mit Hilfe dieses Operators können wir durch

$$\mathbb{E}_\psi(A) := \langle A\psi, \psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_\psi^a$$

den Erwartungswert der Messwerte einer Observable a für einen Zustand ψ beschreiben.

Bei vielen Observablen ist der beschreibende Operator aber direkt bestimmbar (siehe Kapitel 7). Sei a eine Observable beschrieben durch den Operator A. Wir wollen nun die Observable zum Ja-Nein Experiment „Befindet sich der gemessene Wert zum Zustand ψ im Bereich $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$?“ beschreiben. Für den Fall, dass der gemessene Wert innerhalb des Bereichs liegt, weisen wir den Wert 1 zu und für den gegenteiligen Fall, den Wert 0. Also entspricht unsere

[4]Die Existenz solcher Projektionen wurde von A. M. Gleason (siehe [G]) bewiesen.

neue Observable formal dem Ausdruck $\chi_\Delta(a)$. Der Erwartungswert der Messwerte von $\chi_\Delta(a)$ bezüglich eines Zustandes ψ entspricht genau der Wahrscheinlichkeit, dass der Messwert der Observable a bezüglich ψ im Bereich Δ liegt. Mit Hilfe des Funktionalkalküls lässt sich diese Wahrscheinlichkeit eindeutig über

$$\langle \chi_\Delta(A)\psi, \psi\rangle = \langle E_A(\Delta)\psi, \psi\rangle = \mu_\psi(\Delta)$$

beschreiben. Die Observable $\chi_\Delta(a)$ wird also durch den Operator $\chi_\Delta(a) = E_A(\Delta)$ beschrieben. Damit lässt sich Axiom 4 äquivalent auch über die Beschreibung der Ja-Nein Experimente formulieren.

Physikalisch gesehen sollte $\mathbb{E}_\psi(A)$ für alle möglichen Zustände des Quantensystems Sinn ergeben. Dies ist jedoch mathematisch nicht möglich, wie man bereits am Beispiel der Position eines Teilchens auf dem Hilbertraum $L^2(\mathbb{R})$ einsehen kann. Wie oben motiviert, wird der Operator der Positionsmessung durch $\psi \mapsto x\psi$ definiert[5]. Es gibt aber $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ für die $x\psi$ nicht quadratisch integrierbar sind. Da das Skalarprodukt eine Funktion von $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ ist, ist für so ein ψ das Skalarprodukt $\langle x\psi, \psi\rangle$ nicht definiert.

Das generelle Problem liegt darin, dass nicht alle Observablen durch beschränkte lineare Operatoren beschrieben werden können. Unbeschränkte lineare Operatoren lassen sich jedoch nicht in sinnvoller Weise, also nicht einmal als abgeschlossene Operatoren, auf dem gesamten Hilbertraum definieren. Um die Zustände von $\mathcal{H}$ ausreichend genau beschreiben zu können, fordern wir, dass der Definitionsbereich von A, $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H}$ dicht in $\mathcal{H}$ liegt. Wir wollen eine Observable aber auch mit bestmöglicher Genauigkeit beschreiben. Deshalb fordern wir, dass keine echte Erweiterung $\tilde{A}$ von A exisiert um eine Observable zu beschreiben. Wir werden in folgendem Kapitel sehen, dass wegen den geforderten Eigenschaft an den Operator A aus Axiom 3, der Definitionsbereich im Allgemeinen nicht den gesamten Hilbertraum darstellt. Die geforderte Eigenschaft an die Definition einer Observablen aus Axiom 2b benötigen wir, um die Selbstadjungiertheit der beschreibenden Operatoren folgern zu können (siehe Kapitel 6) und ist in der Praxis für alle Observablen erfüllt.

Motivation zu Axiom 4:
Wie bereits erwähnt, ist in der Quantenmechanik eine Messung eine Beeinflussung des Systems. Um dies festzustellen, führen wir ein Ja-Nein Experiment zweimal unmittelbar hintereinander durch. Man beobachtet, dass der Ausgang des ersten Experiments mit dem des zweiten übereinstimmt. Nach dem ersten Experiment befindet sich das System also offenbar in einem veränderten Zustand $\tilde{\psi}$, für den der Ausgang des Experiments festgelegt ist. Mathematisch können wir diese Beobachtung für ein Ja-Nein Experiment im Bereich $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ bezüglich einer Observable a nun, mit Hilfe des Operators $E_A(\Delta)$, der uns über den Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren zur Verfügung steht, beschreiben. Ist der Ausgang des ersten Experiments positiv, soll $\langle E_A(\Delta)\tilde{\psi}, \tilde{\psi}\rangle = 1$ gelten. Da $E_A(\Delta)$ ein Projektor ist, können wir

$$\tilde{\psi} = \frac{E_A(\Delta)\psi}{\|E_A(\Delta)\psi\|}$$

wählen und erhalten das geforderte Ergebnis. Da $\|E_A(\Delta)\psi\| \neq 0$ genau dann, wenn das Experiment positiv ausgeht, macht der Nenner in obigem Ausdruck keine Probleme. Ist der Ausgang des ersten Ja-Nein Experiments bezüglich Δ negativ, bzw. das Ja-Nein Experiment bezüglich

[5] Eine genauere Betrachtung dieser Observable wird in späterem Kapitel durchgeführt.

$\mathbb{R} \setminus \Delta$ positiv, so können wir den veränderten Zustand durch

$$\tilde{\psi} = \frac{E_A(\mathbb{R} \setminus \Delta)\psi}{\|E_A(\mathbb{R} \setminus \Delta)\psi\|} = \frac{(I - E_A(\Delta))\psi}{\|(I - E_A(\Delta))\psi\|}$$

beschreiben.

Motivation zu Axiom 5:
Nun kommen wir zur zeitlichen Entwicklung eines Quantensystems. Ist das System zum Zeitpunkt 0 in einem gewissen Zustand $\psi(0)$ gegeben, soll es eine eindeutig bestimmte zeitliche Entwicklung $\psi(t)$ für $t \in \mathbb{R}$ des Systems geben. Wir schreiben

$$U(t)\psi(0) = \psi(t), \quad t \in \mathbb{R}.$$

Aus Experimenten ist bekannt, dass sich dieser Operator linear verhält. Da $\|\psi(t)\| = 1$ für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt, folgt $\|U(t)\psi\| = \|\psi\|$, $t \in \mathbb{R}$. Die Operatoren $U(t)$ müssen also unitär sein.
Da die zeitliche Entwicklung des Systems, ausgehend von einem Anfangszustand, eindeutig sein soll, müssen auch folgende zwei Bedingungen erfüllt sein:

$$U(0) = \mathcal{I} \quad \text{und} \quad U(t+s) = U(t)U(s).$$

Also ist $\{U(t)\}$ eine wie in [BL] definierte Halbgruppe. Zusätzlich können wir für diese Halbgruppe unitärer Operatoren die starke Stetigkeit

$$\lim_{t \to 0} \|U(t)\psi - \psi\| = 0, \quad \psi \in \mathcal{H},$$

fordern, da dies mit den realen Verhaltensweisen zeitlicher Entwicklungen vereinbar ist.

Jede solche Halbgruppe hat einen infinitesimalen Erzeuger H, definiert durch

$$\begin{aligned}
&\mathcal{D}(H) := \{\psi \in \mathcal{H} |\lim_{t \to 0} \frac{1}{t}(U(t)\psi - \psi) \text{ existiert}\} \\
&H\psi := \lim_{t \to 0} \frac{i}{t}(U(t)\psi - \psi).
\end{aligned}$$

Dieser Operator wird, motiviert durch die klassische Mechanik, Hamilton-Operator genannt und beschreibt die Energie des Systems.

Wenn $\psi(0) \in \mathcal{D}(H)$ erfüllt ist, ist $\psi(t)$ eine Lösung der **Schrödingergleichung**

$$i\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t).$$

6 Folgerungen aus den Axiomen

Aus den oben formulierten Axiomen lässt sich bereits folgern, dass die Observablen durch selbstadjungierte Operatoren beschrieben werden müssen.

Der Ausdruck $\langle A\psi, \psi\rangle$ wird auch als **quadratische Form** $q_A(\psi) := \langle A\psi, \psi\rangle$, $\psi \in \mathcal{D}(A)$ bezeichnet.

Lemma 6.1. *Ein dicht definierter linearer Operator ist genau dann symmetrisch, wenn dessen quadratische Form nur reelle Werte annimmt.*

Beweis.
Ist A ein symmetrischer Operator, dann gilt

$$q_A(\psi) = \langle A\psi, \psi\rangle = \langle \psi, A\psi\rangle = \overline{\langle A\psi, \psi\rangle} = \overline{q_A(\psi)}.$$

Also muss q_A reellwertig sein.
Ist umgekehrt q_A reellwertig, zeigt die Gleichheit

$$q_A(\psi + i\phi) = \langle A(\psi + i\phi), \psi + i\phi\rangle = q_A(\psi) + q_A(\phi) + i(\langle A\phi, \psi\rangle - \langle A\psi, \phi\rangle),$$

dass $\mathrm{Re}\langle A\phi, \psi\rangle = \mathrm{Re}\langle A\psi, \phi\rangle = \mathrm{Re}\langle \phi, A\psi\rangle$ gelten muss. Ersetzt man in der letzten Gleichheit ϕ durch $i\phi$, so erhält man $\mathrm{Im}\langle A\phi, \psi\rangle = \mathrm{Im}\langle \phi, A\psi\rangle$, wodurch die Symmetrieeigenschaft von A folgt.

□

Aus der Definition von $\mathcal{D}(A^*)$ folgt

$$A \subseteq B \Rightarrow B^* \subseteq A^*.$$

Für einen selbstadjungierten Operator A mit symmetrischer Erweiterung B gilt also $A \subseteq B \subseteq B^* \subseteq A^* = A$, woraus $A = B$ folgt und uns folgende Proposition liefert.

Proposition 6.2. *Selbstadjungierte Operatoren sind maximal definiert. Das heißt, jede symmetrische Erweiterung eines selbstadjungierten Operators A stimmt bereits mit A überein.*

Definition 6.3. Ein Operator $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ wird als **nichtnegativ** (**positiv**) bezeichnet, wenn $q_A(\psi) \geq 0$ (> 0) für alle $\psi \in \mathcal{D}(A)$ erfüllt ist.

Wenn A ein positiver (und damit symmetrischer) Operator ist, ist die Abbildung $(\psi, \phi) \mapsto \langle A\psi, \phi\rangle$ für $\psi, \phi \in \mathcal{D}(A)$ ein Skalarprodukt. Es kann mit diesem Skalarprodukt aber Cauchy-Folgen geben, die bezüglich dem ursprünglichen Skalarprodukt keine Cauchy-Folgen sind. Eine Vervollständigung von $\mathcal{D}(A)$ kann dann nicht mit einem Teilraum von $\mathcal{H}$ identifiziert werden. Für nichtnegativen Operator A führen wir deshalb das Skalarprodukt

$$\langle \psi, \phi\rangle_A := \langle (A+1)\psi, \phi\rangle \qquad \psi, \phi \in \mathcal{D}(A)$$

ein. Die dadurch induzierte Norm erfüllt $\|\psi\| \leq \|\psi\|_A$.

Lemma 6.4. *Mit der Notation von oben gilt: Die Vervollständigung von $\mathcal{D}(A)$ bezüglich $\langle\cdot,\cdot\rangle_A$, die wir als $\mathcal{H}_A$ bezeichnen, kann als linearer Teilraum von $\mathcal{H}$ identifiziert werden. $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H}_A \hookrightarrow \mathcal{H}$*

Beweis.
Sei $(\psi_n) \in \mathcal{D}(A)$ eine Cauchy-Folge bezüglich $\|\cdot\|_A$, dann ist sie auch eine Cauchy-Folge in $\mathcal{H}$ bezüglich $\|\cdot\|$. Wir können also den Grenzwert der Cauchy-Folge aus $\mathcal{H}$ mit dem der Cauchy-Folge aus $\mathcal{H}_A$ identifizieren.

Diese Identifikation ist eindeutig, wenn für jede Cauchy-Folge $(\phi_n) \in \mathcal{D}(A)$ aus $\mathcal{H}_A$ mit $\|\phi_n\| \to 0$ in $\mathcal{H}$, auch $\|\phi_n\|_A \to 0$ in $\mathcal{H}_A$ gilt. Sei also $\epsilon > 0$ gegeben. Die Folge (ϕ_n) ist beschränkt in $\mathcal{H}_A$, daher gilt $\|\phi_n\|_A \leq \sup_{k\in\mathbb{N}} \|\phi_k\|_A < +\infty$. Mit Hilfe der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung gilt

$$\begin{aligned}
\|\phi_n\|_A^2 &= \langle \phi_n, \phi_n\rangle_A = \langle \phi_n - \phi_m, \phi_n\rangle_A + \langle \phi_m, \phi_n\rangle_A \\
&\leq \|\phi_n - \phi_m\|_A \|\phi_n\|_A + \|(A+1)\phi_m\| \|\phi_n\| \\
&\leq \|\phi_n - \phi_m\|_A \sup_{k\in\mathbb{N}} \|\phi_k\|_A + \|(A+1)\phi_m\| \|\phi_n\|.
\end{aligned}$$

Weil (ϕ_n) eine Cauchy-Folge in $\mathcal{H}_A$ ist, existiert ein $N_1 \in \mathbb{N}$, sodass gilt $\|\phi_n - \phi_m\|_A < \frac{\epsilon}{2\sup_{k\in\mathbb{N}} \|\phi_k\|_A}$ für $n, m \geq N_1$. Setzen wir mit $m = N_1$ in die obere Ungleichung ein, erhalten wir

$$\|\phi_n\|_A^2 \leq \frac{\epsilon}{2} + \|(A+1)\phi_{N_1}\| \|\phi_n\| \quad n \geq N_1$$

Da (ϕ_n) eine Nullfolge bezüglich $\|\cdot\|$ ist, existiert ein $N_2 \geq N_1$, sodass gilt $\|\phi_n\| \leq \frac{\epsilon}{2\|(A+1)\phi_{N_1}\|}$ für alle $n \geq N_2$. Wir erhalten

$$\|\phi_n\|_A^2 \leq \frac{\epsilon}{2} + \|(A+1)\phi_{N_1}\| \frac{\epsilon}{2\|(A+1)\phi_{N_1}\|} = \epsilon$$

für alle $n \geq N_2$. Damit ist $\|\phi_n\|_A \to 0$ erfüllt.

□

Der Operator $(A+1)$ ist injektiv. Es stellt sich die Frage, ob durch Erweiterung auch Bijektivität erreicht werden kann.

Lemma 6.5. *Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ein nichtnegativer Operator. Dann existiert eine nichtnegative Erweiterung $\tilde{A}$ mit* $\operatorname{Ran}(\tilde{A}+1) = \mathcal{H}$

Beweis.
Wir definieren den Operator $\tilde{A}$ durch

$$\begin{aligned}
&\mathcal{D}(\tilde{A}) := \{\psi \in \mathcal{H}_A \mid \exists \tilde{\psi} \in \mathcal{H} : \langle \psi, \phi\rangle_A = \langle \tilde{\psi}, \phi\rangle, \quad \phi \in \mathcal{H}_A\} \\
&\tilde{A}\psi := \tilde{\psi} - \psi.
\end{aligned}$$

Da die Gleichheit in der Definitionsmenge für ein $\tilde{\psi}$ auf dem dichten Teilraum $\mathcal{H}_A$ erfüllt sein muss, ist $\tilde{\psi}$ wohldefiniert. Für $\psi \in \mathcal{D}(\tilde{A})$ gilt

$$\langle \tilde{A}\psi, \psi\rangle = \langle \tilde{\psi} - \psi, \psi\rangle = \langle \tilde{\psi}, \psi\rangle - \|\psi\|^2 = \langle \psi, \psi\rangle_A - \|\psi\|^2 = \|\psi\|_A^2 - \|\psi\|^2.$$

Da $\|\psi\| \leq \|\psi\|_A$ gilt, ist $\tilde{A}$ ein nichtnegativer Operator.

Sei $\tilde{\psi} \in \mathcal{H}$, dann ist die Abbildung $\phi \mapsto \langle \tilde{\psi}, \phi\rangle$ ein stetiges lineares Funktional auf $\mathcal{H}_A$. Nach dem Rieszschen Darstellungssatz existiert daher ein $\psi \in \mathcal{H}_A$, sodass $\langle \tilde{\psi}, \phi\rangle = \langle \psi, \phi\rangle_A$ für $\phi \in \mathcal{H}_A$ erfüllt ist. Da nach Definition $(\tilde{A}+1)\psi = \tilde{\psi}$ gilt, ist damit $\operatorname{Ran}(\tilde{A}+1) = \mathcal{H}$ erfüllt.

□

Bemerkung 6.6.
Wie sich leicht überprüfen lässt, gilt für einen linearen Operator A

$$\operatorname{Ran}(A)^\perp = \operatorname{Ker}(A^*).$$

Satz 6.7. *Observablen werden durch selbstadjungierte Operatoren beschrieben.*

Beweis.
Ist A ein Operator einer Observable, so ist A^2 ein nichtnegativer Operator und nach Lemma 6.5 existiert eine nichtnegative Erweiterung $\tilde{A}$, die $\mathrm{Ran}(\tilde{A}+1) = \mathcal{H}$ erfüllt. Nach Axiom 2b beschreibt A^2 die Observable a^2 und nach Axiom 2a ist damit A^2 maximal definiert. Daher stimmt A^2 bereits mit $\tilde{A}$ überein und es gilt $\mathrm{Ran}(A^2+1) = \mathcal{H}$. Es existiert also für jedes $\phi \in \mathcal{H}$ ein $\psi \in \mathcal{D}(A^2+1) = \mathcal{D}(A^2)$, sodass

$$(A^2+1)\psi = (A-i)(A+i)\psi = (A+i)(A-i)\psi = \phi$$

erfüllt ist. Aus $\psi \in \mathcal{D}(A^2)$ folgt $A\psi \in \mathcal{D}(A)$ und daher gilt $(A \pm i)\psi \in \mathcal{D}(A)$. Es existiert also für jedes $\phi \in \mathcal{H}$ ein Element $\varphi \in \mathcal{D}(A)$, mit $(A \pm i)\varphi = \phi$, also $\mathrm{Ran}(A \pm i) = \mathcal{H}$.
Ist A^* eine echte Erweiterung von A, gilt $\mathrm{Ker}(A^* \pm i) \neq 0$ und damit $\mathrm{Ran}(A \mp i)^\perp \neq 0$ im Widerspruch zu $\mathrm{Ran}(A \pm i) = \mathcal{H}$.

□

Mit der Erkenntnis, dass Observablen durch selbstadjungierte Operatoren beschrieben werden, können wir nun einige mathematischen Ergebnisse aus den ersten Kapiteln physikalisch interpretieren.

Ist a eine Observable, die durch den Operator A beschrieben wird. Aus der Motivation zu Axiom 3 wissen wir, dass wir für einen Bereich $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ die Observable $\chi_\Delta(a)$ durch den Operator $E_A(\Delta)$ beschreiben können. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich der Messwert der Observable a vom Zustand ψ im Bereich Δ liegt, ist gegeben durch $\langle E_A(\Delta)\psi, \psi\rangle$. Für $\Delta = \sigma(A)$ gilt nach Satz 2.6, dass $\langle E_A(\sigma(A))\psi, \psi\rangle = 1$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$ gilt. Also sind die möglichen Messwerte einer Observable im Spektrum des beschreibenden Operators enthalten. Wegen Lemma 2.5 existiert für jedes $\lambda \in \sigma(A)$, $\epsilon > 0$ ein Zustand ψ, für den die Wahrscheinlichkeit $\langle E(\lambda-\epsilon, \lambda+\epsilon)\psi, \psi\rangle > 0$ ist. Also können tatsächlich alle Werte des Spektrums von A gemessen werden.

Die möglichen Messwerte einer Observable sind genau durch das Spektrum des entsprechenden Operators gegeben.

7 Der Orts- und Impulsoperator

Wir wollen uns nun die Konstruktion von Operatoren, die Observablen beschreiben, genauer ansehen. Dazu betrachten wir die zwei wichtigsten Beispiele: den Orts- und Impulsoperator in einer Dimension. Diese lassen sich auch ohne großen Aufwand über das Tensorprodukt auf $\mathbb{R}^3$ erweitern. Außerdem werden wir sehen, dass die beiden Operatoren unitär äquivalent und somit eng miteinander verbunden sind.

Der Ortsoperator auf $L^2(\mathbb{R})$

Satz 7.1. *Sei Q definiert als:*

$$\mathcal{D}(Q) := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \int_{\mathbb{R}} x^2|\psi(x)|^2 dx < +\infty\}$$
$$(Q\psi)(x) := x\psi(x).$$

Dann ist $Q \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ unbeschränkt und selbstadjungiert. Es gilt $\sigma(Q) = \sigma_{ess}(Q) = \mathbb{R}$.

Beweis.

Da z.B. $C_0^\infty(\mathbb{R}) \subseteq \mathcal{D}(Q)$ gilt und dieser Raum dicht in $L^2(\mathbb{R})$ liegt, ist der Definitionsbereich von Q dicht. Man betrachte die Funktionenfolge (ϕ_n) mit $\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2(2n!)}} x^n e^{-\frac{|x|}{2}}$: Für $n \in \mathbb{N}$ gilt $\|\phi_n\| = 1$ aber $\|Q\phi_n\|^2 = (2n+1)(2n+2)$. Daher ist Q unbeschränkt.
Für $\psi, \phi \in \mathcal{D}(Q)$ gilt

$$\langle Q\psi, \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}} x\psi(x)\overline{\phi(x)}dx = \int_{\mathbb{R}} \psi(x)\overline{x\phi(x)}dx = \langle \psi, Q\phi \rangle,$$

also ist Q ein symmetrischer Operator. Für die Selbstadjungiertheit bleibt noch $\mathcal{D}(Q^*) \subseteq \mathcal{D}(Q)$ zu zeigen: Ist $\phi \in \mathcal{D}(Q^*)$, so existiert ein $\eta \in L^2(\mathbb{R})$ mit $\langle Q\psi, \phi \rangle = \langle \psi, \eta \rangle$ für alle $\psi \in \mathcal{D}(Q)$ oder äquivalent

$$\int_{\mathbb{R}} \psi(x)\overline{(x\phi(x) - \eta(x))}dx = 0 \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(Q).$$

Wegen $C_0^\infty \subseteq \mathcal{D}(Q)$ wissen wir aus [J], Lemma 1.7, dass $x\phi(x) = \eta(x)$ für fast alle $x \in \mathbb{R}$ erfüllt ist. Wegen $\eta \in L^2(\mathbb{R})$ gilt also $x\phi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ und damit $\phi \in \mathcal{D}(Q^*)$.

Sei $\lambda \in \mathbb{R}$ und $\epsilon > 0$. Für die Funktion $\psi_\epsilon := \frac{1}{2\epsilon}\chi_{(\lambda-\epsilon,\lambda+\epsilon)}$ gilt $\psi_\epsilon \in \mathcal{D}(Q)$ und $\|\psi_\epsilon\| = 1$. Wegen

$$\|(Q-\lambda)\psi_\epsilon\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |x-\lambda|^2 |\frac{1}{2\epsilon}\chi_{(\lambda-\epsilon,\lambda+\epsilon)}|^2 dx = \frac{1}{4\epsilon^2}\int_{(\lambda-\epsilon,\lambda+\epsilon)} |x-\lambda|^2 dx \leq \frac{1}{4\epsilon^2} 2\epsilon\, \epsilon^2 = \frac{\epsilon}{2}$$

ist $(\psi_{\frac{1}{n}})$ eine Weylfolge und nach Lemma 1.5 gilt damit $\lambda \in \sigma(Q)$. Da Q selbstadjungiert ist, folgt $\sigma(Q) = \mathbb{R}$. Auf dieser Menge existieren klarerweise keine isolierten Punkte, also $\sigma(Q) = \sigma_{ess}(Q)$.

□

Um später die Wahrscheinlichkeiten der Ortsmessungen explizit zu berechnen, wollen wir nun das Spektralmaß von Q genauer untersuchen.

Lemma 7.2. *Sei die Abbildung $E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ definiert durch*

$$E(\Delta)\psi := \chi_\Delta \psi,\ \forall \Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R}), \forall \psi \in L^2(\mathbb{R})$$

und E_Q das Spektralmaß bezüglich Q. Dann ist E ein Spektralmaß und es gilt $\langle E(\Delta)\psi, \phi \rangle = \langle E_Q(\Delta)\psi, \phi \rangle$, $\forall \Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R}), \forall \psi, \phi \in L^2(\mathbb{R})$.

Beweis.
E ist ein Spektralmaß: Wegen $\|E(\Delta)\psi\| = \|\chi_\Delta\psi\| \leq \|\psi\|$ ist $E(\Delta)$ beschränkt. Wegen $\langle \chi_\Delta\psi, \phi \rangle = \langle \chi_\Delta^2\psi, \phi \rangle = \langle \psi, \chi_\Delta\phi \rangle$ ist $E(\Delta)$ selbstadjungiert und damit eine orthogonale Projektion. $E(\mathbb{R}) = I$ und $E(\emptyset) = 0$ ist erfüllt. Für $\Delta_1, \Delta_2 \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ gilt $E(\Delta_1)E(\Delta_2)\psi = \chi_{\Delta_1}\chi_{\Delta_2}\psi = \chi_{\Delta_1\cap\Delta_2}\psi = E(\Delta_1 \cap \Delta_2)\psi$. Für $\Delta_n, n \in \mathbb{N}$ paarweise disjunkt gilt $\sum_n E(\Delta_n)\psi = \sum_n \chi_{\Delta_n}\psi = \chi_{\cup_n\Delta_n}\psi = E(\cup_n\Delta_n)\psi$.

Wir zeigen $\Phi_E = \Phi_{E_Q}$. Wegen der Eigenschaft $\Phi_E(\chi_\Delta) = E(\Delta)$ folgt damit die Behauptung. Es gilt

$$\nu_{\psi,\phi}(\Delta) := \langle E(\Delta)\psi, \phi \rangle = \langle \chi_\Delta\psi, \phi \rangle = \int_\Delta \psi(\lambda)\overline{\phi(\lambda)}d\lambda.$$

Also ist $|\psi|^2$ die Dichte von ν_ψ bezüglich dem σ-endlichen positiven Maß auf $L^2(\mathbb{R})$. Wegen dem Spektralsatz und der Definition der Integration bezüglich eines positiven Maßes mit Dichte bezüglich dem Maß auf $L^2(\mathbb{R})$ (siehe [K2], Definition 16.2.8) gilt deshalb:

$$\|\Phi_E(\mathrm{id})\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\nu_\psi = \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 |\psi(\lambda)|^2 d\lambda.$$

Über die Definition der L^2-Norm gilt:

$$\|\Phi_{E_Q}(\mathrm{id})\psi\|^2 = \|Q\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 |\psi(\lambda)|^2 d\lambda.$$

Also stimmen die Definitionsbereiche von Φ_E und Φ_{E_Q} überein. Mit der Polarformel erhalten wir

$$\langle \Phi_E(\mathrm{id})\psi, \phi\rangle = \langle \Phi_{E_Q}(\mathrm{id})\psi, \phi\rangle \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(\Phi_E(\mathrm{id})), \phi \in L^2(\mathbb{R})$$

und, da die Spektralzerlegung eindeutig ist, $\Phi_E = \Phi_{E_Q}$.

□

Der Impulsoperator $-i\frac{d}{dx}$ auf $L^2(\mathbb{R})$

Unser Ziel ist es, einen selbstadjungierten Operator auf L^2 für die formelle Ableitung $-i\frac{d}{dx}$ zu konstruieren. Dieser ist im Allgmeinen unbeschränkt und die Schwierigkeit des Unterfangens liegt in der Wahl des geeigneten Definitionsbereichs für den Operator.

Lemma 7.3. *Sei $J = (a, b) \subseteq \mathbb{R}$ ein offenes Intervall mit $-\infty \leq a < b \leq +\infty$. Der Operator $P_{ac} : P_{ac}\psi := \alpha\psi'$ mit $\mathcal{D}(P_{ac}) = AC(J) := \{\psi \in L^2(J) \mid \psi$ ist absolut stetig, $\psi' \in L^2(J)\}$, $\alpha \in \mathbb{C}$ ist genau dann symmetrisch, wenn $\mathrm{Re}\,\alpha = 0$ und $J = \mathbb{R}$ gilt.*

Beweis.
Der Operator ist linear und, da z.B. $C_0^\infty(J)$ in $AC(J)$ enthalten ist und dicht in $L^2(J)$ liegt, gilt $P_{ac} \subseteq \mathcal{L}(L^2(J))$. Durch partielle Integration folgt für $\psi, \phi \in AC(J)$

$$\langle P_{ac}\psi, \phi\rangle = \langle \alpha\psi', \phi\rangle = \alpha([\psi, \phi]_J - \langle \psi, \phi'\rangle) = \alpha[\psi, \phi]_J + \langle \psi, -\overline{\alpha}\phi'\rangle$$

mit $[\psi, \phi]_J := \lim_{x\to b-} \overline{\phi(x)}\psi(x) - \lim_{x\to a+} \overline{\phi(x)}\psi(x)$. Der erste Term der rechten Seite verschwindet genau dann für alle $\psi, \phi \in AC(J)$, wenn $J = \mathbb{R}$ erfüllt ist. Im zweiten Term gilt genau dann $-\overline{\alpha}\phi' = P_{ac}\phi$, wenn $\mathrm{Re}\,\alpha = 0$ erfüllt ist.

□

Durch die physikalische Anwendung motiviert wird $\alpha = -i$ gesetzt. Nun wollen wir den Operator P_{ac} so einschränken, dass wir auch für andere Intervalle einen symmetrischen Operator erhalten.

Lemma 7.4. *Sei J ein offenes Intervall und $D_c := \{\psi \in AC(J) \mid \mathrm{supp}\,\psi$ ist kompakt$\}$ und P_c definiert als $P_c := P_{ac}|_{D_c}$. Dann gilt P_c ist symmetrisch und $P_c^* = P_{ac}$.*

Beweis.
Da wieder $C_0^\infty \subseteq D_c$ gilt, ist P_c ein dicht definierter Operator. Für alle $\psi \in D_c, \phi \in AC(J)$ gilt $[\psi, \phi]_J = 0$ und daher $\langle P_c\psi, \phi\rangle = \langle \psi, P_{ac}\phi\rangle$, also $(P_c \subseteq) P_{ac} \subseteq P_c^*$.

Für die umgekehrte Inklusion ist zu prüfen: Existiert ein $\eta \in L^2(J)$ mit $\langle P_c\psi, \phi\rangle = \langle \psi, \eta\rangle$ für alle $\psi \in D_c, \phi \in L^2(J)$, so gilt bereits $\phi \in AC(J)$. Wir wählen ein beliebiges kompaktes Intervall $K = [\alpha, \beta] \subseteq J$ und definieren

$$\eta_K^*(x) := \begin{cases} \int_\alpha^x \eta(t)dt + c & x \in K \\ 0 & x \in J \setminus K, \end{cases}$$

wobei die Wahl von c erst später festgelegt wird. Nach dem verallgemeinerten Hauptsatz der Integralrechnung ist η_K^* absolut stetig und es gilt $(\eta_K^*)' = \chi_K \eta$ im L^2-Sinn. Sei $\psi_K \in D_c$ mit $\operatorname{supp} \psi_K \subseteq K$. Durch partielle Integration folgt

$$\begin{aligned} \langle P_c \psi_K, \phi \rangle &= \langle \psi_K, \eta \rangle \\ \langle -i\psi_K', \phi \rangle &= \langle \psi_K, \chi_K \eta \rangle = \underbrace{[\psi_K, \eta_K^*]}_{0} - \langle \psi_K', \eta_K^* \rangle \end{aligned}$$

und daher $0 = \langle \psi_K', i\phi + \eta_K^* \rangle$.
Sei nun

$$\eta_K^{**}(x) := \begin{cases} \int_\alpha^x \eta_K^*(t) + i\phi(t)dt & x \in K \\ 0 & x \in J \setminus K. \end{cases}$$

Wählt man jetzt c so, dass $\eta_K^{**}(\beta) = 0$ erfüllt ist, gilt $\eta_K^{**} \in D_c$. Wir können nun $\psi_K = \eta_K^{**}$ wählen und erhalten

$$0 = \langle (\eta_K^* + i\phi)\chi_K, i\phi + \eta_K^* \rangle = \|(\eta_K^* + i\phi)\chi_K\|^2.$$

Das bedeutet $\eta_K^* = -i\phi\chi_K$. Also ist ϕ absolut stetig auf K mit $i\eta(x) = \phi'(x)$ für fast alle $x \in K$. Da $K \subseteq J$ beliebig war, gilt $\phi \in AC(J)$, was zu zeigen war.

□

Wegen $P_c^* = P_{ac}$ ist P_{ac} ein abgeschlossener Operator. Nun definieren wir den Operator

$$P := \overline{P_c}.$$

Wegen Bemerkung 1.4 Punkt 6 gilt $P^* = P_c^* = P_{ac}$ sowie $P = P^{**} = P_c^{**} = P_{ac}^*$.

Ein $\psi \in AC(J)$ können wir einen stetigen Repräsentant der Äquivalenzklasse wegen der Integrierbarkeit auf $\overline{J}$ stetig fortsetzen und erhalten $\psi \in AC(\overline{J})$. Da ψ außerhalb einer L^2-Nullmenge nicht definiert sein muss, gilt $AC(J) = AC(\overline{J})$. Wir schreiben für einen Intervallrand $a \in \mathbb{R}$ auch $\psi(a)$ für $\lim_{x \to a+} \psi(x)$.

Lemma 7.5. *Für die drei Fälle*

1. $J = (a,b):$ $\quad D := \{\psi \in AC(a,b) \mid \psi(a) = \psi(b) = 0\}$
2. $J = (0,\infty):$ $\quad D := \{\psi \in AC(0,\infty) \mid \psi(0) = 0\}$
3. $J = \mathbb{R}:$ $\quad D := AC(\mathbb{R})$

sei der Operator P_D jeweils definiert als $P_D := P_{ac}|_D$. Es gilt in allen drei Fällen $P_D = P$.

Beweis.
Wenn wir zeigen, dass P_D ein abgeschlossener symmetrischer Operator mit $P_D^* = P_{ac}$ ist, sind wir wegen $P_D = P_D^{**} = P_{ac}^* = P$ fertig. P_D ist symmetrisch, wenn $[\psi, \phi]_J$ für alle $\psi \in D, \phi \in L^2(\mathbb{R})$ verschwindet. Im ersten Fall ist dies klarerweise erfüllt, in den anderen beiden folgt es unmittelbar wegen $\psi \in L^2(J)$. Wegen $P_D \subseteq P_{ac}$ folgt $(P_{ac} \subseteq) P_{ac}^* \subseteq P_D^*$ und wegen $P_c \subseteq P_D$ folgt wiederum $P_D^* \subseteq P_c^* = P_{ac}$.
Also ist noch zu zeigen, dass P_D abgeschlossen ist. Für den dritten Fall gilt $P_D = P_{ac}$, also ist P_D selbstadjungiert und damit abgeschlossen. Für die anderen zwei Fälle zeigen wir $\mathcal{D}(P_D^{**}) \subseteq \mathcal{D}(P_D)(= D)$. Für $\psi \in \mathcal{D}(P_D^{**})$ gilt die Adjungiertengleichung

$$\phi \in \mathcal{D}(P_D^{**}): \quad \langle P_D^* \psi, \phi \rangle = \langle \psi, P_D^{**} \phi \rangle, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(P_D^*) = AC(J).$$

Aus $P_D \subseteq P_{ac}$ folgt $P_{ac}^* = P_D \subseteq P_D^*$ und da P_{ac} abgeschlossen ist, weiters $P_{ac}^{**} = P_{ac} \supseteq P_D^{**}$. Daher können wir in die Adjungiertengleichung auch P_{ac} einsetzen:

$$\phi \in \mathcal{D}(P_D^{**}) : \quad \langle P_{ac}\psi, \phi\rangle = \langle \psi, P_{ac}\phi\rangle, \quad \forall \psi \in AC(J)$$

Damit muss $[\psi, \phi]_J = 0$ für alle $\psi \in AC(J)$ erfüllt sein. Für $J = (a, b)$ kann $\psi \in AC(J)$ als Grenzwert an den Rändern jeden Wert annehmen, also muss $\phi(a) = \phi(b) = 0$ erfüllt sein. Genauso muss $\phi(0) = 0$ im Fall $J = (0, \infty)$ gelten. In beiden Fällen folgt $\phi \in D$ und damit $\mathcal{D}(P_D^{**}) \subseteq D$.

□

Zusammenfassend haben wir nun gezeigt:

Satz 7.6. *Für jedes offene Intervall $J \in \mathbb{R}$ existiert genau ein abgeschlossener symmetrischer Operator P auf $L^2(J)$, der den formalen Ausdruck $-i\frac{d}{dx}$ beschreibt und $P^* = P_{ac}$ erfüllt. Dabei ist P genau dann selbstadjungiert, wenn $J = \mathbb{R}$ gilt.*

Die Bedingung $P^* = P_{ac}$ bedeutet, der Definitionsbereich der Adjungierten von P wird maximal gewählt.

Bemerkung 7.7.
Der Operator P ist unbeschränkt, denn wir finden immer eine Folge normierter Funktionen in D, für die die L^2-Norm der Ableitung gegen unendlich strebt. Als Beispiel betrachten wir $J = (0, 1)$: Für $n \in \mathbb{N}$ sei $\psi_n(x) := \sqrt{2}\sin(2\pi nx)$. Es gilt $\|\psi_n\| = 1$ aber $\|P\psi_n\| = 2\pi n \to \infty$.

Es stellt sich nun die Frage, ob sich der Operator P in den beiden Fällen $J = (a, b)$ und $J = (0, \infty)$ zu einem selbstadjungierten Operator erweitern lässt. Im zweiten Fall müsste für eine Erweiterung eine Funktion ψ im Definitionsbereich liegen mit $\psi(0) \neq 0$. Dann folgt aber $[\psi, \psi]_J \neq 0$, weshalb die Symmetrie verloren geht.

Korollar 7.8. *Sei $J = (a, b)$ ein endliches Intervall und $\theta \in \mathbb{C}$ mit $|\theta| = 1$. Dann ist für $D_\theta := \{\psi \in AC(a, b) \mid \psi(a) = \theta\psi(b)\}$ der Operator $P_\theta := P_{ac}\,|_{D_\theta}$ eine selbstadjungierte Erweiterung von P.*

Beweis.
Für $\psi, \phi \in D_\theta$ gilt

$$[\psi, \phi]_J = \psi(b)\overline{\phi(b)} - \psi(a)\overline{\phi(a)} = \psi(b)\overline{\phi(b)} - \underbrace{\overline{\theta}\theta}_{1}\psi(b)\overline{\phi(b)} = 0,$$

also ist P_θ selbstadjungiert. Da für $\psi \in D$ ja $\psi(a) = \psi(b) = 0$ gilt, ist $\psi(a) = \theta\psi(b)$ trivialerweise erfüllt, deswegen $D \subseteq D_\theta$.

□

Unitäre Äquivalenz von Q und P

Aus der Theorie der Fouriertransformation kennen wir bereits die Beziehung $\widehat{(-ixf)}(y) = \hat{f}'(y)$, für $xf \in L^1$, sowie die entsprechende inverse Aussage. Wie sich herausstellt, lässt sich diese Beziehung auch für die Operatoren auf ganz L^2 erweitern.
Aus der Definition eines unitären Operators folgt unmittelbar die Bijektivität und Beschränktheit. Wegen der Polarformel gilt $\langle U\psi, U\phi\rangle = \langle \psi, \phi\rangle$ und deshalb weiters $\langle \psi, U^{-1}\phi\rangle =$

$= \langle U\psi, UU^{-1}\phi\rangle = \langle U\psi, \phi\rangle$ für $\phi, \psi \in \mathcal{H}$, womit $U^* = U^{-1}$ folgt.

Definition 7.9. Zwei Operatoren $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißen **unitär äquivalent**, wenn ein unitärer Operator $U \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ existiert, sodass $A = UBU^{-1}$ gilt.

Proposition 7.10. *Seien $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ unitär äquivalent mit $A = UBU^{-1}$. Dann gilt*

1. $A^* = UB^*U^{-1}$
2. *Wenn B selbstadjungiert (symmetrisch) ist, folgt auch, dass A selbstadjungiert (symmetrisch) ist.*
3. $\sigma(A) = \sigma(B)$

Beweis.

1. Für $C \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$,$D \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ folgt $(CD)^* = D^*C^*$: Wegen $C \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ gilt $\mathcal{D}(CD) = \mathcal{D}(D)$. Da C^* auf ganz $\mathcal{H}$ definiert ist folgt:
$$\langle CD\psi, \phi\rangle = \langle D\psi, C^*\phi\rangle \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(D)$$
Also erhalten wir $\phi \in \mathcal{D}((CD)^*)$ genau dann, wenn $C^*\phi \in \mathcal{D}(D^*)$ erfüllt ist. $C^*\phi \in \mathcal{D}(D^*)$ bedeutet aber genau $\phi \in \mathcal{D}(D^*C^*)$.
Mit $C = U$ und $D = BU^{-1}$ erhalten wir also $A^* = (UBU^{-1})^* = (BU^{-1})^*U^* = (BU^*)^*U^*$. $(BU^*)^* = UB^*$ ist noch zu zeigen: Für $\phi \in \mathcal{D}(UB^*) = \mathcal{D}(B^*)$ gilt
$$\langle BU^*\psi, \phi\rangle = \langle U^*\psi, B^*\phi\rangle = \langle \psi, UB^*\phi\rangle \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(BU^*),$$
daher $(BU^*)^* \subseteq UB^*$. Für $\phi \in \mathcal{D}((BU^*)^*)$ gilt wegen der Isometrie von U^*:
$$\langle BU^*\psi, \phi\rangle = \langle \psi, (BU^*)^*\phi\rangle = \langle U^*\psi, U^*(BU^*)^*\phi\rangle \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(BU^*).$$
Damit gilt $B^* \subseteq U^*(BU^*)^*$ und weil U bijektiv auf $\mathcal{H}$ ist $UB^* \subseteq (BU^*)^*$ ist. Wir erhalten $(BU^*)^* = UB^*$ und damit insgesamt $A = UB^*U^{-1}$.
2. Aus $B \subseteq B^*$ folgt die Inklusion $UBU^{-1} \subseteq UB^*U^{-1}$. Wir erhalten $A = UBU^{-1} \subseteq UB^*U^{-1} = A^*$. Für B selbstadjungiert ersetzt man die Inklusionen durch Gleichheiten.
3. Mit A und B unitär äquivalent, sind für $\lambda \in \mathbb{C}$ auch $(A-\lambda)$ und $(B-\lambda)$ unitär äquivalent. Für $\lambda \in \rho(B)$ gilt $\operatorname{Ran}(A-\lambda) = U \operatorname{Ran}(B-\lambda) = \mathcal{H}$, sowie $\operatorname{Ker}(A-\lambda) = U \operatorname{Ker}(B-\lambda) = \{0\}$. Damit gilt $\lambda \in \sigma(A)$. Vertauscht man die Rollen von A und B, erhält man insgesamt $\rho(A) = \rho(B)$ und damit $\sigma(A) = \sigma(B)$.

□

Es sei nun an den stetig fortgesetzten Operator der Fouriertransformation $\hat{\cdot}$ aus [K2], Korollar 14.1.15 erinnert, welcher auch **Fourier-Plancherel Operator** heißt.

Satz 7.11. *Es gibt einen eindeutigen, linearen, bijektiven und isometrischen Operator F auf $L^2(\mathbb{R})$, sodass $F\psi = \hat{\psi}$, wenn $\psi \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$.*

Satz 7.12. *Die oben definierten Operatoren P und Q sind unitär äquivalent. Es gilt $P = F^{-1}QF$, wobei F der Fourier-Plancherel-Operator ist.*

Beweis.
Sei $T := FQF^{-1}$. Wir zeigen $T \subseteq P$. Da T und P nach Proposition 7.10 bzw. Satz 7.6 selbstadjungiert sind, gilt damit schon $T = P$. Der Operator T ist definiert für alle $\psi = F^{-1}\phi$, für die $\phi \in \mathcal{D}(Q) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \int_{\mathbb{R}} x^2|\psi(x)|^2 dx < +\infty\}$ erfüllt ist. Wir zeigen, dass aus $\phi \in \mathcal{D}(Q)$ auch $\phi \in L^1(\mathbb{R})$ folgt: Für jedes endliche Intervall (a, b) folgt aus $\phi|_{(a,b)} \in L^2((a, b))$ auch $\phi|_{(a,b)} \in L^1((a, b))$. Damit reicht es aus, die Integrierbarkeit von ϕ auf $M_\epsilon := \mathbb{R} \setminus (-\epsilon, \epsilon)$ zu zeigen. Mit Hilfe der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung gilt

$$\left(\int_{M_\epsilon} |\phi(x)|dx\right)^2 = \left(\int_{M_\epsilon} x^{-1}x|\phi(x)|dx\right)^2 \leq \int_{M_\epsilon} |x|^{-2}dx \int_{M_\epsilon} |x|^2|\phi(x)|^2dx \leq \frac{1}{\epsilon}\|x\phi\|^2 < +\infty.$$

Daher ist $\phi \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ und wir können für $F^{-1}\phi$ die Fourier-Transformation $\hat{\phi}(\cdot -)$ schreiben. Wir können $\psi \in \mathcal{D}(T)$ umschreiben als

$$-i\psi(x) = -i(2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{ixy}\phi(y)dy = (2\pi)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}} \frac{e^{ixy} - 1}{iy} \underbrace{y\phi(y)}_{Q\phi} dy - i \int_{\mathbb{R}} \phi(y)dy\right). \tag{3}$$

Wir wollen nun zeigen, dass wir diese Gleichung ableiten können und dann gilt $-i\psi' = F^{-1}Q\phi = F^{-1}QF\psi$. Dazu sei $e_x := \operatorname{sgn}(x)\chi_{(0,x)}$. Für $x \in \mathbb{R}$ ist diese Funktion in $L^2(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$ und wir können die Fourier-Transformierte von e_x bestimmen: $\hat{e_x}(y) = (2\pi)^{-1/2}(e^{ixy} - 1)(iy)^{-1}$. Es gilt

$$\langle \psi, \hat{e_x} \rangle = \langle \psi, Fe_x \rangle = \langle F^{-1}\psi, e_x \rangle = \operatorname{sgn}(x) \int_0^x (F^{-1}\psi)(y)dy.$$

Für beliebiges endliches Intervall (a, b) ist die Funktion $x \mapsto H(x) := \int_a^x (F^{-1}\psi)(y)dy$ wegen $F^{-1}\psi\ |_{(a,b)} \in L^1((a, b))$ absolut stetig und es gilt $H'(x) = (F^{-1}\psi)(x)$. Wegen $H(x) = \langle \psi, Fe_x \rangle + c$ mit festes $c \in \mathbb{C}$ ist auch $x \mapsto \langle \psi, Fe_x \rangle$ absolut stetig. Es folgt

$$H'(x) = (F^{-1}\psi)(x) = \frac{d}{dx}\langle \psi, Fe_x \rangle = \frac{d}{dx}\langle \psi, \hat{e_x} \rangle = \frac{d}{dx} \int_{\mathbb{R}} \hat{e_x}(y)\psi(y)dy.$$

Setzen wir $\hat{e_x}$ ein, erhalten wir die Gleichheit

$$(F^{-1}\psi)(x) = (2\pi)^{-1/2} \frac{d}{dx} \int_{\mathbb{R}} (e^{ixy} - 1)(iy)^{-1}\psi(y)dy. \tag{4}$$

Wir kehren nun zurück zu unserer Gleichung (3). Weil wir gerade gezeigt haben, dass $x \mapsto \langle \psi, \hat{e_x} \rangle$ absolut stetig ist, können wir die Gleichung ableiten:

$$-i\psi'(x) = (2\pi)^{-1/2} \frac{d}{dx} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{ixy} - 1}{iy} (Q\phi)(y)dy.$$

Nun können wir in Gleichung (4), mit $\psi = Q\phi$, einsetzen und erhalten

$$-i\psi' = (F^{-1}Q\phi) = (F^{-1}QF\psi) = T\psi, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(T).$$

Wir haben gezeigt, dass die rechte Seite von (3) absolut stetig ist. Also ist auch ψ absolut stetig und als Bild von Operatoren auf $L^2(\mathbb{R})$ gilt $\psi' \in L^2(\mathbb{R})$. Daher ist $\psi \in \mathcal{D}(P)$ und wir sind bei der Erkenntnis $T \subseteq P$ angelangt.

□

8 Anwendungsbeispiele in einer Dimension

Zustand eines Teilchens ohne Potential

Als elementares Beispiel betrachten wir ein Teilchen in einer Dimension ohne äußere Einwirkungen. Als einfachsten unendlichdimensionalen Hilbertraum wählen wir wieder $L^2(\mathbb{R})$. Die fundamentalen physikalischen Größen eines Teilchens sind die Position und der Impuls. Diese werden durch die bereits hergeleiteten Operatoren Q und P aus vorigem Kapitel beschrieben. Betrachten wir also ein Teilchen in einem Zustand, beschrieben durch die Wellenfunktion $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Wegen $\sigma(Q) = \sigma(P) = \mathbb{R}$ sind alle reellen Messwerte möglich. Die Wahrscheinlichkeit, die Position des Teilchens im Bereich $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ zu messen, lässt sich nach Axiom 3 und Lemma 7.2 berechnen durch

$$\langle E_Q(\Delta)\psi, \psi\rangle = \langle \chi_\Delta \psi, \psi\rangle = \int_\Delta |\psi(\lambda)|^2 d\lambda.$$

Wegen der unitären Äquivalenz von Q und P lässt sich nun auch die Wahrscheinlichkeit einer Messung des Impuls in einem Bereich $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ leicht berechnen: Wir wissen für jeden selbstadjungierten Operator A existiert ein eindeutiges Spektralmaß E_A und damit eine eindeutige Abbildung Φ_A mit den Eigenschaften aus Satz 2.2, sodass $\langle A\psi, \phi\rangle = \langle \Phi_A(\mathrm{id})\psi, \phi\rangle$ gilt. Wegen $P = F^{-1}QF$, mit dem Fourier-Plancherel Operator F aus Satz 7.11, gilt für alle $\psi \in \mathcal{D}(P), \phi \in \mathcal{H}$

$$\langle \Phi_P(\mathrm{id})\psi, \phi\rangle = \langle P\psi, \phi\rangle = \langle F^{-1}QF\psi, \phi\rangle = \langle F^{-1}\Phi_Q(\mathrm{id})F\psi, \phi\rangle.$$

Es lässt sich leicht überprüfen, dass $F^{-1}E_Q(\cdot)F$ ein Spektralmaß ist, daher erfüllt $F^{-1}\Phi_Q(\cdot)F$ die Eigenschaften aus Satz 2.2 und muss somit mit Φ_P übereinstimmen. Setzen wir nun die Funktion $\chi_\Delta, \Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ in die Abbildung Φ_P ein, erhalten wir

$$\langle E_P(\Delta)\psi, \phi\rangle = \langle F^{-1}E_Q(\Delta)F\psi, \phi\rangle \quad \forall \Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R}).$$

Die Wahrscheinlichkeit, einen Impuls im Bereich $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ zu messen, können wir damit berechnen durch:

$$\begin{aligned}\langle E_P(\Delta)\psi, \psi\rangle &= \langle F^{-1}E_Q(\Delta)F\psi, \psi\rangle = \langle E_Q(\Delta)F\psi, E_Q(\Delta)F\psi\rangle \\ &= \|E_Q(\Delta)\underbrace{F\psi}_{=:\phi}\|^2 = \int_\Delta |\phi(\lambda)|^2 d\lambda.\end{aligned}$$

Für ψ die zusätzlich aus $L^1(\mathbb{R})$ sind, erhalten wir die vereinfachte Formel

$$\langle E_P(\Delta)\psi, \psi\rangle = \int_\Delta |\widehat{\psi}(\lambda)|^2 d\lambda.$$

Eine weitere wichtige physikalische Größe ist die kinetische Energie. Sie wird beschrieben durch den Operator

$$H_0 := \frac{1}{2m}P^2, \text{ mit } \mathcal{D}(H_0) = \{\psi \in AC(\mathbb{R}) \mid \psi' \in AC(\mathbb{R})\},$$

wobei m die Masse des Teilchens ist. Nach Satz 2.8 gilt mit $f(x) := \frac{x^2}{2m}$ die Identität

$$\sigma(H_0) = \sigma(f(P)) = \overline{f(\sigma(P))} = [0, +\infty).$$

Nach Proposition 2.4 ist das Spektralmaß von $f(P)$ gegeben durch $E_P(f^{-1}(\cdot))$. Damit folgt mit $\phi := F\psi$

$$\begin{aligned}\langle E_{H_0}(\Delta)\psi, \psi\rangle &= \langle E_P(f^{-1}(\Delta))\psi, \psi\rangle = \langle F^{-1}E_Q(f^{-1}(\Delta))F\psi, \psi\rangle = \langle E_Q(f^{-1}(\Delta))\phi, \phi\rangle \\ &= \int_{f^{-1}(\Delta)} |\phi(\lambda)|^2 d\lambda.\end{aligned}$$

Der rechteckige Potentialtopf

Wir betrachten den Operator

$$\begin{aligned}(H\psi)(x) &:= \psi''(x) + V(x)\psi(x)\\ \mathcal{D}(H) &:= \mathcal{D}(P^2)\end{aligned}$$

mit $V(x) := -V_0\chi_{[-a,a]}(x)$ für $V_0, a > 0$. Sei V der Multiplikationsoperator $(V\psi)(x) := V(x)\psi(x)$. Wegen der einfachen Form von $V(x)$ ist der Operator V selbstadjungiert und für $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ gilt $\|V\psi\| \leq |V_0|\|\psi\|$. Für $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ mit $\operatorname{supp}\psi \in [-a, a]$ gilt $\|V\psi\| = |V_0|$, daher ist der Operator V beschränkt mit $\|V\| = |V_0|$.

Wir können den Operator H schreiben als $H = P^2 + V$. Bis auf die Konstante $\frac{\hbar}{2m}$ ($\hbar$ ist das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum und m der Masse des Teilchens) entspricht dieser Operator dem Hamiltonoperator eines Teilchens im rechteckigen Potentialtopf. Dabei entspricht P^2 der kinetischen Energie und V der potentiellen Energie.

Wir wollen nun das Spektrum dieses Operators untersuchen. Für $\psi \in \mathcal{D}(H)$ gilt:

$$\langle H\psi, \psi\rangle = \langle P^2\psi, \psi\rangle + \langle V\psi, \psi\rangle \geq -V_0 \int_{[-a,a]} |\psi(x)|^2 dx \geq -V_0\|\psi\|.$$

Daher gilt nach Korollar 2.7 die Inklusion $\sigma(H) \subseteq [-V_0, +\infty)$.

Für das Punktspektrum betrachten wir die Gleichung

$$-\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad E \in \mathbb{R}$$

auf den drei Intervallen $(-\infty, -a], [-a, a]$ und $[a, +\infty)$ getrennt, mit dem üblichen Ansatz $\psi(x) = Ae^{\sqrt{(V(x)-\lambda)}x} + Be^{-\sqrt{(V(x)-\lambda)}x}$. Wir definieren $\kappa := \sqrt{-E}$ und $k := \sqrt{E + V_0}$. Durch die Normierungsbedingung erhalten wir die Bedingung $E < 0$ und damit $E \in [-V_0, 0)$. Über die Stetigkeitsbedingungen für $\psi \in \mathcal{D}(H) = \{\psi \in AC(\mathbb{R}) \mid \psi' \in AC(\mathbb{R})\}$ erhalten wir eine endliche Anzahl von einfachen Eigenwerten $E_n \in (-V_0, 0)$, gegeben durch die Gleichungen $ka\tan(ka) = \kappa a$ und $ka\cot(ka) = -\kappa a$. Ordnen wir die Eigenwerte aufsteigend mit $E_1 < E_2 \ldots < E_N$, sind die zugehörigen Eigenvektoren gegeben durch

$$\psi_n : \psi_n(x) := \begin{cases} C_n \sin(k_n x - \frac{n\pi}{2}) & |x| \leq a \\ C_n (\operatorname{sgn} x)^{n+1} \sin(k_n a - \frac{n\pi}{2}) e^{\kappa_n(a-|x|)} & |x| \geq a. \end{cases}$$

Dabei sei C_n der Normierungsfaktor $C_n := \sqrt{\kappa_n/(1 + a\kappa_n)}$.

Nachdem das Punktspektrum von H aus endlich vielen Eigenwerten mit eindimensionalem Eigenraum besteht, gehört der Rest des Spektrums zum essentiellen Spektrum $\sigma_{ess}(H)$. Aus vorigem Beispiel wissen wir, dass $\sigma(P^2) = [0, +\infty)$. Daher kann es keine isolierten Punkte im Spektrum von P^2 geben und es folgt $\sigma(P^2) = \sigma_{ess}(P^2)$. Wir wollen nun Satz 3.6 mit $A = P^2$ und $B = P^2 + V$ anwenden. Nach Bemerkung 3.7 sind die Voraussetzungen für Satz 3.6 erfüllt, wenn P^2 relativ kompakt bezüglich V ist.

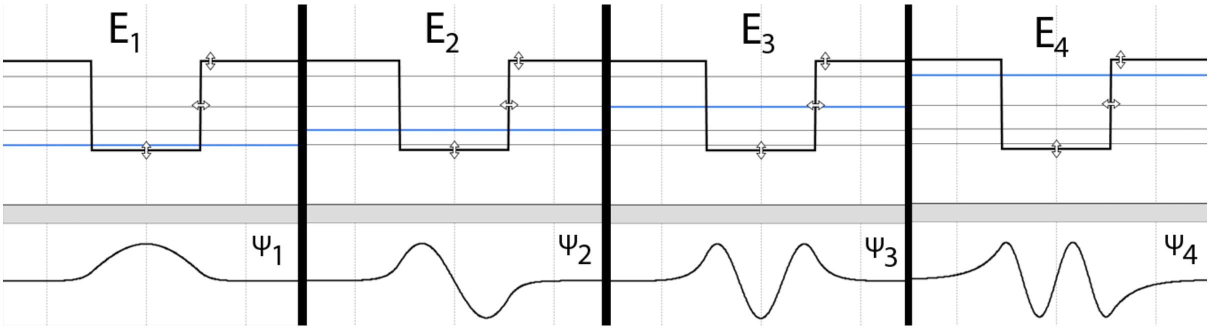

Abbildung 3: Energielevel im Potentialtopf

Wir zeigen, dass für $\kappa > 0$ der Operator $(P^2+\kappa^2)^{-1}$ als Hilbert-Schmidt Operator dargestellt werden kann:

Sei N der Hilbert-Schmidt Operator definiert durch

$$N\psi(x) := \frac{1}{2\kappa}\int_{\mathbb{R}} e^{-\kappa|x-y|}\psi(y)dy.$$

Es gilt

$$\begin{aligned}N(P^2+\kappa^2)\psi(x) =& \frac{1}{2\kappa}\int_{\mathbb{R}} e^{-\kappa|x-y|}(-\psi''(y)+\kappa^2\psi(y))dy\\ =& \frac{1}{2\kappa}\int_{(-\infty,x)} e^{\kappa(y-x)}(-\psi''(y)+\kappa^2\psi(y))dy + \frac{1}{2\kappa}\int_{(x,+\infty)} e^{\kappa(x-y)}(-\psi''(y)+\kappa^2\psi(y))dy\end{aligned}$$

- $\boxed{y < x}$

  Mit zweifacher partieller Integration gilt

$$\frac{1}{2\kappa}\int_{(-\infty,x)} e^{\kappa(y-x)}(-\psi''(y)+\kappa^2\psi(y))dy =$$
$$= -\frac{1}{2\kappa}\left(\psi'(x) - \kappa\psi(x) + \int_{(-\infty,x)}\kappa^2 e^{\kappa(y-x)}\psi(y)dy - \int_{(-\infty,x)}\kappa^2 e^{\kappa(y-x)}\psi(y)dy\right) =$$
$$= -\frac{1}{2\kappa}\psi'(x) + \frac{1}{2}\psi(x).$$

- $\boxed{y > x}$

  Analoges Vorgehen führt auf

$$\frac{1}{2\kappa}\int_{(x,+\infty)} e^{\kappa(x-y)}(-\psi''(y)+\kappa^2\psi(y))dy = \frac{1}{2\kappa}\psi'(x) + \frac{1}{2}\psi(x).$$

Insgesamt erhalten wir also $N(P^2+\kappa^2)\psi(x) = \psi(x)$ für $x \in \mathbb{R}$.

Wegen

$$\left|\left(e^{-\kappa|x-y|}\psi(y)\right)'\right| = e^{-\kappa|x-y|}\left|\kappa\psi(y)+\psi'(y)\right| \leq \left|\kappa\psi(y)+\psi'(y)\right|$$

existiert eine integrierbare Majorante für die erste Ableitung des Integranden. Genauso kann man eine geeignete Abschätzung für die zweite Ableitung des Integranden finden. Daher können wir Integration und Differentiation vertauschen und es gilt

$$(P^2+\kappa^2)N\psi = N(P^2+\kappa^2)\psi = \psi, \quad \psi \in L^2(\mathbb{R})$$

und daher $N = (P^2+\kappa^2)^{-1}$.

Nach Satz 3.8 ist damit $(P^2+\kappa^2)^{-1}$ und daher auch $V(P^2+\kappa^2)^{-1}$ kompakt. Wir erhalten nun das gewünschte Resultat

$$\sigma_{ess}(P^2) = \sigma_{ess}(H) = [0, +\infty).$$

Literatur

[B] Jiří Blank, Pavel Exner, Miloslav Havlíček: *Hilbert Space Operators in Quantum Physics*, Springer Verlag, 2008

[T] Gerald Teschl: *Mathematical Methods in Quantum Mechanics*, American Mathematical Society, 2009

[N] John von Neumann: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Springer Verlag, 1932

[BL] Martin Blümlinger: *Funktionalanalysis II*, Skriptum, 2010

[K] Michael Kaltenbäck: *Funktionalanalysis II*, Skriptum, 2010

[W] Harald Woracek, Michael Kaltenbäck, Martin Blümlinger: *Funktionalanalysis I*, Skriptum, 2011

[J] Ansgar Jüngel: *Partielle Differentialgleichungen*, Skriptum, 2009

[K2] Michael Kaltenbäck: *Analysis III*, Skriptum, 2009

[G] A. M. Gleason, *Measures on the closed subspaces of a Hilbert space*, Journal of Mathematics and Mechanics 6: 885–893, 1957